



Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Факультет вычислительной математики и кибернетики
Кафедра вычислительных технологий и моделирования

Ануприенко Денис Валерьевич

**Повышение эффективности решения нелинейных
задач при моделировании процесса ненасыщенной
фильтрации**

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

Научный руководитель:
с.н.с. ИВМ РАН, к.ф.-м.н.
И.В. Капырин

Содержание

1	Введение	3
1.1	Актуальность проблемы	3
1.2	Постановка задачи	3
2	Изучение задачи в одномерном случае	5
2.1	Постановка одномерной задачи	5
2.2	Дискретизация	6
2.2.1	Метод конечных разностей с центральной аппроксимацией K . .	6
2.2.2	Метод конечных объемов с противопотоковой аппроксимацией K	6
2.3	Решение получающихся систем нелинейных уравнений	7
2.3.1	Модифицированный метод простой итерации (ММПИ)	7
2.3.2	Метод Ньютона	8
2.3.3	Методы решения линейных систем	9
2.4	Тестирование	10
2.4.1	Задача Celia	10
2.4.2	Песок	12
2.4.3	Песок и гравий	13
2.5	Выводы из изучения одномерных задач	15
3	Трёхмерный случай	15
3.1	Дискретизация уравнений	15
3.2	Тестирование	15
3.2.1	Задача Celia	16
3.2.2	Задача Celia в кубе	17
3.2.3	Задача о капиллярном барьере	17
3.2.4	Распространение загрязнения в неоднородной зоне аэрации . . .	19
4	Заключение	21

Список таблиц

1	Параметры различных сред	10
2	Celia, $T = 1$ сутки, шаг сетки $h = 1$ см, МКР + BiCGStab	10
3	Celia, $T = 1$ сутки, шаг сетки $h = 1$ см, МКР + LU	11
4	Celia, $T = 1$ сутки, шаг сетки $h = 1$ см, МКО + BiCGStab	11
5	Celia, $T = 1$ сутки, шаг сетки $h = 1$ см, МКО + LU	11
6	Celia, насыщенно-ненасыщенные условия, $T = 1000$ с, шаг сетки $h = 1$ см, МКО + BiCGStab	12
7	Сухой песок, $T = 116$ суток, шаг сетки $h = 1$ см, МКО + прогонка . . .	12
8	Песок + гравий, $T = 3.5$ суток, шаг сетки $h = 1$ см, МКО + BiCGStab	13
9	Celia, $T = 1$ сутки, шаг сетки $h = 1$ см	16
10	Celia, $T = 1$ сутки, шаг сетки $h = 2.5$ см	16
11	Celia в кубе, $T = 1$ сутки, сетка из 10000 ячеек	17
12	Капиллярный барьер, моделирование на срок 1 сутки	18
13	Расчет задачи распространения примеси в неоднородной зоне аэрации, $T = 110$ суток.	20

1 Введение

1.1 Актуальность проблемы

В настоящее время в связи с реализацией Федеральных целевых программ «Обеспечение ядерной и радиационной безопасности на 2008 год и на период до 2015 года» и «Обеспечение ядерной и радиационной безопасности на 2016-2020 год и на период до 2030 года» получили большое значение задачи обеспечения безопасности захоронения радиоактивных отходов (РАО).

Для моделирования процессов распространения радионуклидов в подземных водах и неоднородных пористых геологических средах в Институте вычислительной математики РАН и Институте безопасного развития атомной энергетики РАН разрабатывается расчетный код GeRa (Геомиграция Радионуклидов) [1] [2]. Этот программный комплекс позволяет проводить полный цикл гидродинамического моделирования: построение геологической модели и ее параметризация; наполнение базы данных мониторинга; построение расчетной сетки; сами численные расчеты; визуализация результатов моделирования. GeRa позволяет моделировать следующие процессы:

- стационарная и нестационарная фильтрация: насыщенная и насыщенно-ненасыщенная, напорно-безнапорная;
- перенос примесей в подземных водах: диффузионный, дисперсионный и адвективный;
- плотностная конвекция;
- радиоактивный распад первого порядка в подземных водах с учетом цепочек распада;
- равновесная сорбция компонент по изотерме Генри;
- изменение коэффициента межфазного распределения (изотерма Генри) в зависимости от концентрации одной из примесей;
- перенос компонент с расчетом химических реакций.

Ненасыщенная фильтрация протекает в зоне между поверхностью земли и уровнем грунтовых вод. Это важный процесс в гидрогеологии и в частности в задачах распространения РАО, потому что многие хранилища находятся именно в ненасыщенной зоне. В этой работе рассматривается процесс численного моделирования ненасыщенной фильтрации и возможные методы ускорения расчетов по сравнению с нынешней ситуацией в коде GeRa.

1.2 Постановка задачи

Ненасыщенная фильтрация описывается уравнением Ричардса:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + S \cdot s_{stor} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \nabla \cdot (K(\theta) \nabla (\Psi - z)) = Q \quad (1)$$

Здесь приняты следующие обозначения (в квадратных скобках приведены размерности величин, L – единицы длины, T – единицы времени):

- z – вертикальная ось координат, направленная вверх, $[L]$
- θ – объемное влагосодержание, $[-]$
- Ψ – высота всасывания, выражающаяся через напор h соотношением $h = \Psi - z$, $[L]$
- s_{stor} – коэффициент упругой емкости, $[L^{-1}]$
- S – насыщенность, равная $\frac{\theta}{\theta_s}$, где θ_s – влагосодержание при насыщении, $[-]$
- K – коэффициент фильтрации, $[LT^{-1}]$
- Q – удельные объемные источники $[T^{-1}]$

Для связи влагосодержания с высотой всасывания и коэффициентом фильтрации можно использовать различные зависимости, например, модель ван Генухтена – Муалема:

$$\theta(\psi) = \begin{cases} \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + |\alpha\psi|^n]^m}, & \psi < 0 \\ \theta_s, & \psi \geq 0 \end{cases} \quad (2)$$

$$\psi(\theta) = -\frac{1}{\alpha}(S_e^{-1/m} - 1)^{1/n} \quad (3)$$

$$K(\theta) = K_s \cdot K_r(\theta) = K_s \cdot S_e^{1/2} \cdot (1 - [1 - S_e^{1/m}]^m)^2, \quad (4)$$

где

- θ_r – остаточное, т.е. не извлекаемое гравитацией, влагосодержание, $[-]$
- $S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}$ – эффективная насыщенность, $[-]$
- $n \geq 1$, $m = 1 - 1/n$, α – эмпирические параметры модели, характеризующие поры, $[-]$
- K_s – коэффициент фильтрации в насыщенном состоянии, $[LT^{-1}]$
- $K_r(\theta)$ – коэффициент относительной проницаемости, $[-]$.

Применение такой зависимости в уравнении Ричардса делает его сильно нелинейным, особенно в случае сухих почв. Это вносит свои трудности в процесс численного решения.

Численное моделирование ненасыщенной фильтрации, как и многих других процессов, состоит из следующих этапов:

1. Построение расчетной сетки в области.

В GeRa возможно построение треугольнопризматических и гексаэдральных сеток на основе восьмидеревьев.

2. Дискретизация уравнения.

Здесь можно использовать большое количество разных методов. Для дискретизации по времени обычно используется чисто неявная схема, по пространству – например, методы конечных элементов (МКЭ), методы конечных объемов (МКО), метод опорных операторов и другие. В GeRa используются различные схемы МКО.

3. Решение получающихся систем алгебраических уравнений.

Нелинейность уравнения Ричардса приводит к системам нелинейных уравнений, которые решаются итерационными методами. Сейчас в GeRa используется модифицированный метод простой итерации (ММПИ).

В этой работе рассматривается третий этап. Суммарное количество итераций складывается из количества итераций на каждом шаге по времени и количества шагов по времени. Поэтому ускорить расчеты можно снижением этих двух показателей.

Количество итераций на шаге по времени можно понизить, используя методы с более высокой, чем линейная в случае ММПИ, скоростью сходимости. Обычно при расчетах устанавливается не очень большое количество (20–50) ограничение на количество итераций, поэтому здесь можно получить не очень большое ускорение, особенно при использовании методов с более сложными итерациями.

Количество шагов по времени создает особенные трудности при моделировании орошения сухих почв, где ММПИ требует очень мелких шагов по времени. Если избавиться от этих ограничений, то время расчетов может сократиться на порядки.

В качестве альтернативы ММПИ можно рассмотреть метод Ньютона. Его можно скомбинировать с техникой переключения главных переменных [3], что особенно полезно в упомянутом случае сухих почв. Это основной метод, который описывается в этой работе. Для решения проблем, связанных с чувствительностью метода Ньютона к начальному приближению, можно использовать смешанный подход: проведение итераций по ММПИ до достижения некоторой заданной скорости сходимости, а затем завершение итерациями по методу Ньютона [4]. В недавнее время также были рассмотрены специальные переобуславливатели, позволяющие ускорить сходимость различных методов [5].

2 Изучение задачи в одномерном случае

2.1 Постановка одномерной задачи

Перед реализацией в трехмерном случае рассматриваемые методы были протестированы на одномерных задачах. Основополагающие для моделирования ненасыщенной фильтрации исследования были опубликованы в 1990 году Celia [6] для одномерной задачи с нулевым коэффициентом упругой емкости и в отсутствие источников. При таких предположениях используя соотношения ван Генухтена – Муалема можно получить различные формы одномерного уравнения Ричардса:

1. $(\Psi - \theta)$ -форма (смешанная форма):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K(\theta) \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} - 1 \right) \right) \quad (5)$$

2. Ψ -форма:

$$C(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K(\theta(\Psi)) \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} - 1 \right) \right) \quad (6)$$

Здесь $C(\Psi) = \frac{\partial \theta}{\partial \Psi}$ – т.н. дифференциальная влагоемкость, $[L^{-1}]$. При использовании чисто неявной схемы по времени, метода конечных разностей или МКЭ с кусочно-линейными базисными функциями Ψ -форма дает большие ошибки в балансе массы [6].

3. θ -форма:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D(\theta) \left(\frac{\partial \theta}{\partial z} - 1 \right) \right) \quad (7)$$

Здесь $D(\theta) = \frac{K(\theta)}{C(\theta)}$ – коэффициент диффузии в ненасыщенном состоянии, $[L^2 T^{-1}]$. Такую форму записи уравнения Ричардса, в отличие от других форм, можно применять только для ненасыщенной среды.

Из-за нулевого коэффициента упругой емкости описанные выше уравнения непригодны для тех случаев, когда где-либо в расчетной области возникает насыщение. Поэтому в уравнение добавляется член, связанный с коэффициентом упругой емкости, и записывается задача

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta}{\partial t} + S \cdot s_{stor} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K(\theta) \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} - 1 \right) \right), -l < z < 0, 0 < t < T \\ \Psi(0, t) = \psi_A, \Psi(-l, t) = \psi_B, 0 \leq t \leq T \\ \Psi(z, 0) = \psi_0 \end{cases} \quad (8)$$

2.2 Дискретизация

2.2.1 Метод конечных разностей с центральной аппроксимацией K

Проведем дискретизацию для $(\Psi - \theta)$ -формы уравнения с помощью метода конечных разностей на равномерной пространственной сетке $\{z_i | z_i = -ih, i = 0, \dots, N, hN = l\}$ и неявной схемы по времени. Такая же схема может быть получена с помощью метода конечных элементов с базисом кусочно-линейных функций и применением приема сосредоточения массы (mass lumping) (например, так поступили авторы кода HYDRUS-1D [7]).

$$\begin{cases} \frac{\theta_i^{n+1} - \theta_i^n}{\tau} + S^{n+1} \cdot s_{stor} \frac{\Psi_i^{n+1} - \Psi_i^n}{\tau} = \\ = \frac{1}{h} \cdot \left(K_{i+1/2}^{n+1} \frac{\Psi_{i+1}^{n+1} - \Psi_i^{n+1}}{h} - K_{i-1/2}^{n+1} \frac{\Psi_i^{n+1} - \Psi_{i-1}^{n+1}}{h} \right) - \frac{K_{i+1/2}^{n+1} - K_{i-1/2}^{n+1}}{h} \\ K_{i\pm 1/2}^{n+1} = \frac{K_i^{n+1} + K_{i\pm 1}^{n+1}}{2}, i = 1, \dots, N-1 \\ \Psi_0^n = \psi_A, \Psi_N^n = \psi_B, n = 0, 1, \dots \\ \Psi_i^0 = \psi_0, i = 1, \dots, N-1 \end{cases} \quad (9)$$

2.2.2 Метод конечных объемов с противопотоковой аппроксимацией K

В методе конечных объемов степени свободы относятся не к узлам сетки, а к ячейкам. Введем равномерную сетку $\{z_i | z_i = -ih, i = 0, \dots, N, hN = l\}$ с ячейками e_0, \dots, e_{N-1} . Правую часть уравнения (8) можно представить в виде $-\frac{\partial q}{\partial z}$, где $q = -K(\theta)(\frac{\partial \Psi}{\partial z} - 1)$ – поток жидкости. Используем чисто неявную схему для дискретизации по времени и проинтегрируем уравнение по ячейке e_i :

$$\begin{aligned} \int_{e_i} \left(\frac{\theta_i^{n+1} - \theta_i^n}{\tau} + S^{n+1} \cdot s_{stor} \frac{\Psi_i^{n+1} - \Psi_i^n}{\tau} \right) dz + \int_{e_i} \frac{\partial q}{\partial z} dz &= 0, \\ h \cdot \left(\frac{\theta_i^{n+1} - \theta_i^n}{\tau} + S^{n+1} \cdot s_{stor} \frac{\Psi_i^{n+1} - \Psi_i^n}{\tau} \right) + q_{i+1} - q_i &= 0, \end{aligned}$$

$$\frac{\theta_i^{n+1} - \theta_i^n}{\tau} + S^{n+1} \cdot s_{stor} \frac{\Psi_i^{n+1} - \Psi_i^n}{\tau} + \frac{q_{i+1} - q_i}{h} = 0. \quad (10)$$

Это выражение справедливо для всех ячеек. Здесь q_i и q_{i+1} – потоки через ограничивающие ячейку узлы z_i и z_{i+1} . Для внутренних узлов z_1, \dots, z_{N-1} потоки выражаются через значения в разграничиваемых ячейках:

$$q_i = K_{i-1} \left(\frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{h} - 1 \right). \quad (11)$$

Здесь используется противопотоковая аппроксимация коэффициента фильтрации. Так как мы будем рассматривать фильтрацию вглубь почвы, $(i-1)$ -я ячейка будет выше по потоку.

Для граничных узлов потоки через них требуется выражать по-другому, если заданы условия Дирихле:

$$q_0 = K_A \left(\frac{\Psi_0 - \psi_A}{h/2} - 1 \right), \quad (12)$$

где K_A – значение коэффициента фильтрации, соответствующее левому граничному значению высоты всасывания ψ_A ,

$$q_N = K_{N-1} \left(\frac{\psi_B - \Psi_{N-1}}{h/2} - 1 \right). \quad (13)$$

В итоге получим схему

$$\begin{cases} \frac{\theta_i^{n+1} - \theta_i^n}{\tau} + S^{n+1} \cdot s_{stor} \frac{\Psi_i^{n+1} - \Psi_i^n}{\tau} + \frac{q_{i+1} - q_i}{h} = 0, i = 0, \dots, N-1 \\ q_i = K_{i-1} \left(\frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{h} - 1 \right), i = 1, \dots, N-2 \\ q_0 = K_A \left(\frac{\Psi_0 - \psi_A}{h/2} - 1 \right) \\ q_N = K_{N-1} \left(\frac{\psi_B - \Psi_{N-1}}{h/2} - 1 \right) \\ \Psi_i^0 = \psi_0, i = 0, \dots, N. \end{cases} \quad (14)$$

Эта схема представляет больший интерес, чем схема МКР, потому что является аналогом схем, используемых в ПК GeRa.

2.3 Решение получающихся систем нелинейных уравнений

Разностные схемы (9), (14) дают системы нелинейных уравнений. Для их решения могут быть использованы различные итерационные методы, часть из которых опишем ниже.

2.3.1 Модифицированный метод простой итерации (ММПИ)

Этот метод был предложен для смешанной формы уравнения Ричардса в [6]. Обычный метод простой итерации предполагает на $(k+1)$ -й итерации решение уравнения относительно $\theta^{n+1,k+1}$, $\Psi^{n+1,k+1}$ с коэффициентами $K^{n+1,k}$, вычисленными по

значениям с предыдущей итерации. На первой итерации коэффициенты находятся по значениям с предыдущего временного слоя. Рассмотрим этот метод для системы уравнений, которую дает метод конечных разностей.

$$\begin{aligned} \frac{\theta_i^{n+1,k+1} - \theta_i^n}{\tau} + S_i^{n+1,k} \cdot s_{stor} \frac{\Psi_i^{n+1,k+1} - \Psi_i^n}{\tau} = \\ = \frac{1}{h} \cdot \left(K_{i+1/2}^{n+1,k} \frac{\Psi_{i+1}^{n+1,k+1} - \Psi_i^{n+1,k+1}}{h} - K_{i-1/2}^{n+1,k} \frac{\Psi_i^{n+1,k+1} - \Psi_{i-1}^{n+1,k+1}}{h} \right) - \\ - \frac{K_{i+1/2}^{n+1,k} - K_{i-1/2}^{n+1,k}}{h} \end{aligned} \quad (15)$$

Модификация метода простой итерации предложена Celia [6] и состоит в представлении разностной производной влагосодержания по времени в виде

$$\frac{\theta_i^{n+1,k+1} - \theta_i^n}{\tau} \approx C_i^{n+1,k} \frac{\Psi_i^{n+1,k+1} - \Psi_i^{n+1,k}}{\tau} + \frac{\theta_i^{n+1,k} - \theta_i^n}{\tau}, \quad (16)$$

где $C_i^{n+1,k} = \frac{\partial \theta}{\partial \Psi}(\Psi_i^{n+1,k})$. В этом выражении второй член уже известен с предыдущей итерации. После такой замены уравнение разностной схемы (9) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} C_i^{n+1,k} \frac{\Psi_i^{n+1,k+1}}{\tau} + S_i^{n+1,k} \cdot s_{stor} \frac{\Psi_i^{n+1,k+1}}{\tau} - \\ - \frac{1}{h} \cdot \left(K_{i+1/2}^{n+1,k} \frac{\Psi_{i+1}^{n+1,k+1} - \Psi_i^{n+1,k+1}}{h} - K_{i-1/2}^{n+1,k} \frac{\Psi_i^{n+1,k+1} - \Psi_{i-1}^{n+1,k+1}}{h} \right) = \\ = S_i^{n+1,k} \cdot s_{stor} \frac{\Psi_i^n}{\tau} + C_i^{n+1,k} \frac{\Psi_i^{n+1,k}}{\tau} - \frac{\theta_i^{n+1,k} - \theta_i^n}{\tau} - \frac{K_{i+1/2}^{n+1,k} - K_{i-1/2}^{n+1,k}}{h} \end{aligned} \quad (17)$$

Такое представление позволяет записать уравнения ММПИ для (9) и аналогичным образом для (14) в виде линейной системы

$$A(\Psi^{n+1,k}) \Psi^{n+1,k+1} = f(\Psi^{n+1,k}), \quad (18)$$

где $\Psi^{n+1,0} = \Psi^n$.

Итерации повторяются до достижения заданного критерия сходимости. В этой работе итерации останавливались, как только начальная невязка системы (18) снижалась в 10^6 раз или достигала значения 10^{-12} .

2.3.2 Метод Ньютона

При применении такого метода прием (16) не применяется. Уравнения разностной схемы (9) или (14) переписываются в виде системы

$$F^{n+1}(\theta^{n+1}, \Psi^{n+1}) = 0. \quad (19)$$

Для применения метода Ньютона необходимо в уравнениях (19) из двух переменных θ и Ψ выбрать главную. Обычно главная переменная выбирается одной и той же для всех уравнений и этот выбор не меняется в процессе расчетов. Техника переключения главных переменных (primary variable switching technique), предложенная авторами гидрогеологического кода FEFLOW [3], предполагает выбирать главную переменную для уравнения исходя из значения насыщенности в узле (ячейке), которому (которой) соответствует уравнение. Выбор предлагается делать на каждой итерации по следующему принципу:

- если $S_i^{n+1,k} < tol_b$ – выбрать влагосодержание в качестве главной переменной в i -м уравнении
- если $S_i^{n+1,k} \geq tol_f$ – выбрать высоту всасывания в качестве главной переменной в i -м уравнении
- иначе – не менять главную переменную.

Числа tol_f и tol_b могут выбираться по-разному, но должны удовлетворять следующим условиям:

$$tol_f \neq tol_b, tol_f < 1.$$

Авторы FEFLOW предлагают выбирать $tol_f = 0.99$, $tol_b = 0.89$.

Теперь можно записать систему (19) в виде

$$F^{n+1}(X^{n+1}) = 0, \quad (20)$$

где $X_i^{n+1} \in \{\theta_i^{n+1}, \Psi_i^{n+1}\}$.

Итерация метода Ньютона состоит в решении линейной системы

$$J(X^{n+1,k})(X^{n+1,k+1} - X^{n+1,k}) = -F(X^{n+1,k}), \quad (21)$$

где $J(X^{n+1,k})$ – матрица Якоби для F , $J_{ij}(X^{n+1,k}) = \frac{\partial F_i}{\partial X_j}(X^{n+1,k})$.

Для использования метода Ньютона модель ван Генухтена – Муалема (2), (3), (4) дополняется производными влагосодержания по высоте всасывания и наоборот, а также производными относительной проницаемости.

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \theta} = \frac{1}{mn\alpha(\theta_s - \theta_r)}(s_e^{-1/m} - 1)^{1/n-1}(s_e)^{-1-1/m} \quad (22)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \Psi} = (\theta_s - \theta_r) \frac{mn\alpha|\alpha\Psi|^{n+1}}{(1 + |\alpha\Psi|^n)^{m+1}} \quad (23)$$

$$\frac{\partial K_r}{\partial \theta} = \left[2s_e^{1/m-1/2}(1 - s_e^{1/m})^{m-1} + \frac{1}{2\sqrt{s_e}}(1 - (1 - s_e^{1/m})^m) \right] \cdot [1 - (1 - s_e^{1/m})^m] \quad (24)$$

$$\frac{\partial K_r}{\partial \Psi} = \frac{\partial K_r}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \Psi} \quad (25)$$

Итерации (21) ведутся, как и в ММПИ, до понижения начальной невязки в 10^6 раз или до ее достижения значения 10^{-12} .

2.3.3 Методы решения линейных систем

Оба описанных выше метода для решения нелинейных систем уравнений на каждой своей итерации требуют решить систему линейных уравнений. Так как используемые схемы имеют трехточечный и трехячеечный шаблоны, порождаемые матрицы линейных систем являются трехдиагональными. Поэтому для решения здесь естественно использовать метод прогонки. Наряду с методом прогонки были протестированы прямой метод LU -разложения разреженных матриц из пакета UMFPACK [10] и итерационный метод бисопряженных градиентов со стабилизацией (BiCGStab) с переобуславливателем ILU0 из пакета Ani2D [11].

Метод прогонки и BiCGStab показывали практически одинаковые результаты по времени итерации и работали одинаково хорошо и для ММПИ, и для метода Ньютона. Метод LU -разложения оказался непригоден для метода Ньютона из-за накапливающихся погрешностей решения. Примеры задач будут даны ниже.

2.4 Тестирование

Тесты проводились для разных сред и разных начальных и граничных условий, чтобы сравнить поведение методов в различных ситуациях и опробовать технику переключения переменных. Задача Celia взята из работы [6]. Остальные среды взяты из тестов к программному комплексу GeRa.

	Celia	Песок	Гравий
Коэффициент фильтрации K_s , см/с	9.22e-3	2.77e-3	8640
Максимальное влагосодержание θ_s	0.368	0.39	0.42
Остаточное влагосодержание θ_r	0.102	0.045	0.011
α , 1/см	0.0335	0.039	4.9
n	2	5.74	2.19

Таблица 1: Параметры различных сред

Отметим, что в разностных схемах (9) и (14) начальные и граничные условия можно задать для влагосодержания или для насыщенности и использовать модель ван Генухтена – Муалема для получения значений высоты всасывания. Далее в тестах начальные и граничные условия в некоторых случаях приводятся для насыщенности: S_0 – начальная насыщенность, S_A – насыщенность на верхней границе, S_B – насыщенность на нижней границе.

Сравнивались ММПИ, метод Ньютона с переключением переменных (Ньютон) и метод Ньютона в Ψ -форме (Ψ -Ньютон). Во всех тестах, если не оговорено обратное, значениями констант для переключения переменных выбраны $tol_b = 0.89$, $tol_f = 0.99$. Максимальное количество нелинейных итераций на шаге по времени – 150. При использовании BiCGStab в качестве линейного решателя критерием остановки являлось понижение начальной невязки в 10^{12} раз.

Интересующие величины:

- τ_{max} – максимальный шаг по времени, для которого моделирование пройдет успешно (метод сойдется на каждом шаге по времени);
- T_{min} – минимальное время работы программы для решения данной задачи, при этом шаг по времени равен τ_{max} ;
- суммарное количество итераций;
- среднее время итерации.

2.4.1 Задача Celia

Эта задача предложена в [6]. Рассматривается фильтрация в сухую колонку высотой 1 м. Начальные и граничные условия: $S_A = 0.544$, $S_B = 0.299 = S_0$. Период моделирования – 1 сутки = 86400 с.

Решим эту задачу с помощью схемы **метода конечных разностей** и линейного решателя BiCGStab.

	τ_{max} , с	T_{min} , с	Количество итераций	Среднее время итерации, с
ММПИ	≥ 86400	0.058	80	0.00045
Ψ -Ньютон	≥ 86400	0.070	46	0.00125
Ньютон	≥ 86400	0.025	13	0.00135

Таблица 2: Celia, $T = 1$ сутки, шаг сетки $h = 1$ см, МКР + BiCGStab

Все методы хорошо справились с задачей. Ограничений на шаг по времени не налагалось, возможно было провести всего 1 шаг по времени, равный сроку моделирования. Самую быструю сходимость продемонстрировал метод Ньютона с переключением переменных, который из-за слабой насыщенности среды работал фактически в чистой θ -форме. Итерации в обоих вариантах метода Ньютона были более чем в 2 раза затратнее итераций ММПИ.

Теперь решим эту задачу с помощью схемы **метода конечных разностей** и линейного решателя LU .

	τ_{max}, c	T_{min}, c	Количество итераций	Среднее время итерации, c
ММПИ	≥ 86400	0.09	80	0.0008
Ψ -Ньютон	10	86.1	38050	0.0017
Ньютон	1000	3.48	1829	0.0016

Таблица 3: Celia, $T = 1$ сутки, шаг сетки $h = 1$ см, МКР + LU

Метод Ньютона резко ухудшил свои показатели. При проверке решения на более грубых сетках оказалось, что уже после первой итерации полученные значения хотя и несильно, но отличаются от значений, полученных с использованием BiCGStab или прогонки, что со временем приводит к большим отличиям в матрицах Якоби и нарушает работу метода.

Решим эту задачу с помощью схемы **метода конечных объемов** и линейного решателя BiCGStab.

	τ_{max}, c	T_{min}, c	Количество итераций	Среднее время итерации, c
ММПИ	≥ 86400	0.031	50	0.0004
Ψ -Ньютон	80	5.90	3280	0.0016
Ньютон	≥ 86400	0.021	13	0.0012

Таблица 4: Celia, $T = 1$ сутки, шаг сетки $h = 1$ см, МКО + BiCGStab

Отличие в дискретизации (противопотоковый выбор коэффициента фильтрации вместо центрального) заметно повлияло на Ψ -форму метода Ньютона, заставив его накладывать сильные ограничения на шаг по времени, и в меньшей степени на ММПИ, который сократил количество итераций.

Решим теперь эту задачу с помощью схемы **метода конечных объемов**, заменив линейный решатель на метод LU -разложения.

	τ_{max}, c	T_{min}, c	Количество итераций	Среднее время итерации, c
ММПИ	≥ 86400	0.05	50	0.0085
Ψ -Ньютон	1	—	—	0.0020
Ньютон	1000	2.25	1433	0.0014

Таблица 5: Celia, $T = 1$ сутки, шаг сетки $h = 1$ см, МКО + LU

С МКО при смене решателя на LU наблюдались те же явления, что в МКР.

Изменим граничные и начальные условия, сделав среду более насыщенной. На верхней границе установим высоту всасывания $\psi_A = 1$ см (и полное насыщение), на правой границе увеличим насыщенность до $S_B = 0.32$. Так как в таком случае вода станет течь быстрее, срок моделирования сократим до 1000 с. Используем МКО + BiCGStab.

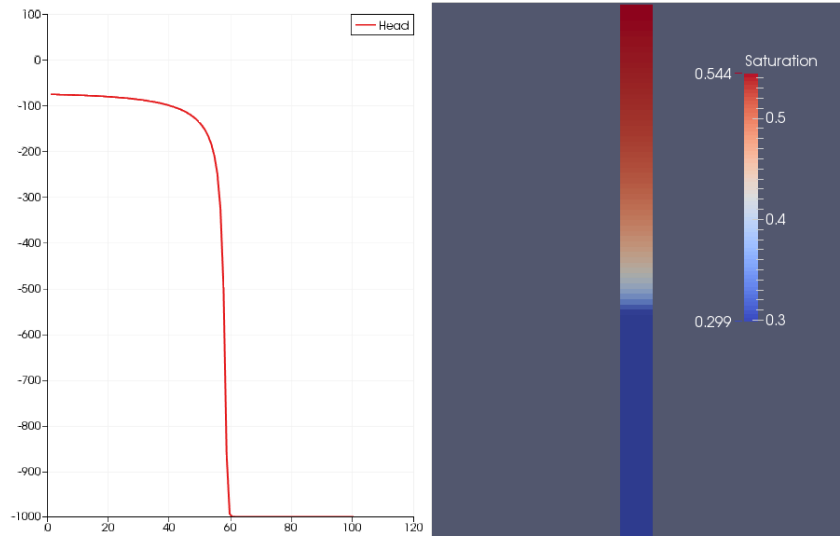


Рис. 1: Финальные значения высоты всасывания и насыщенности. Celia, $T = 1$ сутки, шаг сетки $h = 1$ см, $\tau = 100$ с

	τ_{max} , с	T_{min} , с	Количество итераций	Среднее время итерации, с
ММПИ	50	0.79	1550	0.0003
Ньютон	2	2.00	1258	0.0010
ММПИ+Ньютон	10	0.52	409	0.0009

Таблица 6: Celia, насыщенно-ненасыщенные условия, $T = 1000$ с, шаг сетки $h = 1$ см, МКО + BiCGStab

Здесь метод Ньютона наложил более жесткие ограничения на шаг по времени, чем ММПИ. Тем не менее, он не слишком сильно отстал от ММПИ за счет меньшего количества итераций на шаге по времени. Здесь также была протестирована смешанная версия: совершение 1 итерации по ММПИ и завершение итераций по Ньютону. Такой прием позволил увеличить максимальный шаг по времени в 5 раз по сравнению с Ньютоном и решить задачу быстрее всего.

2.4.2 Песок

Песок входит в задачу о капиллярном барьере (она будет описана ниже), которая является очень тяжелой для решения с помощью ММПИ. Рассмотрим фильтрацию в сухую песчаную колонку высотой 1 м. Зададим условия $\psi_A = -75$ см, $\psi_B = \psi_0 = -1000$ см. Будем моделировать фильтрацию на срок 10^7 с, что составляет почти 116 суток, с помощью МКО + прогонки (результаты идентичны использованию BiCGStab)

	τ_{max}	T_{min} , с	Количество итераций	Среднее время итерации, с
ММПИ	10^5	0.89	1199	0.0004
Ньютон	$\geq 10^7$	0.19	129	0.0012

Таблица 7: Сухой песок, $T = 116$ суток, шаг сетки $h = 1$ см, МКО + прогонка

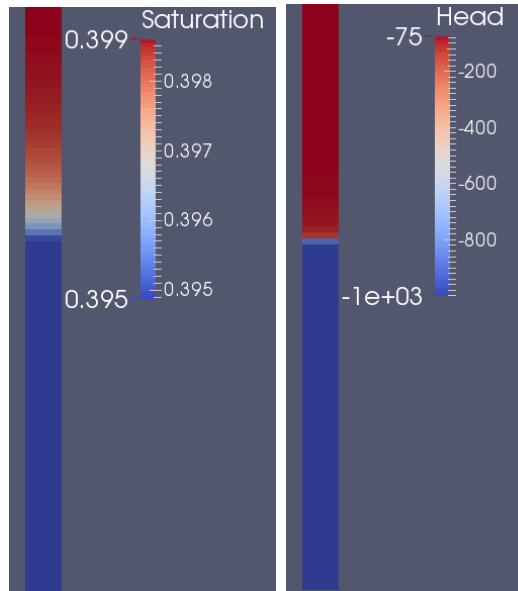


Рис. 2: Финальные значения насыщенности и высоты всасывания. Сухой песок, $T = 116$ суток, шаг сетки $h = 1$ см

Среда оставалась очень сухой на протяжении всего времени моделирования. Здесь метод Ньютона, работавший в чистой θ -форме, позволил брать шаг по времени, превосходящий шаг при использовании ММПИ в 100 раз (и совершить всего 1 шаг, равный всему сроку моделирования), и работал быстрее.

2.4.3 Песок и гравий

Эта задача является одномерным аналогом задачи о капиллярном барьере. Рассматривается фильтрация в сухую колонку, верхняя часть которой состоит из песка, а нижняя – из гравия, что дает резкий перепад в свойствах сред. Зададим условия $\psi_A = -40$ см, $\psi_B = \psi_0 = -100$ см. Срок моделирования – $3 \cdot 10^5$ с, что примерно равно 3.5 суток.

Используем метод конечных объемов с противопотоковым выбором K и BiCGStab в качестве линейного решателя.

	τ_{max}	T_{min}, c	Количество итераций	Среднее время итерации, с
ММПИ	500	6.7	9153	0.0004
Ψ-Ньютон	300	7.8	2887	0.0013
Ньютон	3000	0.78	437	0.0013

Таблица 8: Песок + гравий, $T = 3.5$ суток, шаг сетки $h = 1$ см, МКО + BiCGStab

Здесь вода втекает до зоны раздела сред, но не сразу протекает дальше, а начинает скапливаться на границе. Как только высота всасывания и насыщенность на границе раздела сред достигнут определенных значений, вода протекает в гравий.

ММПИ требовал уменьшить шаг по времени для корректного моделирования протекания в гравий.

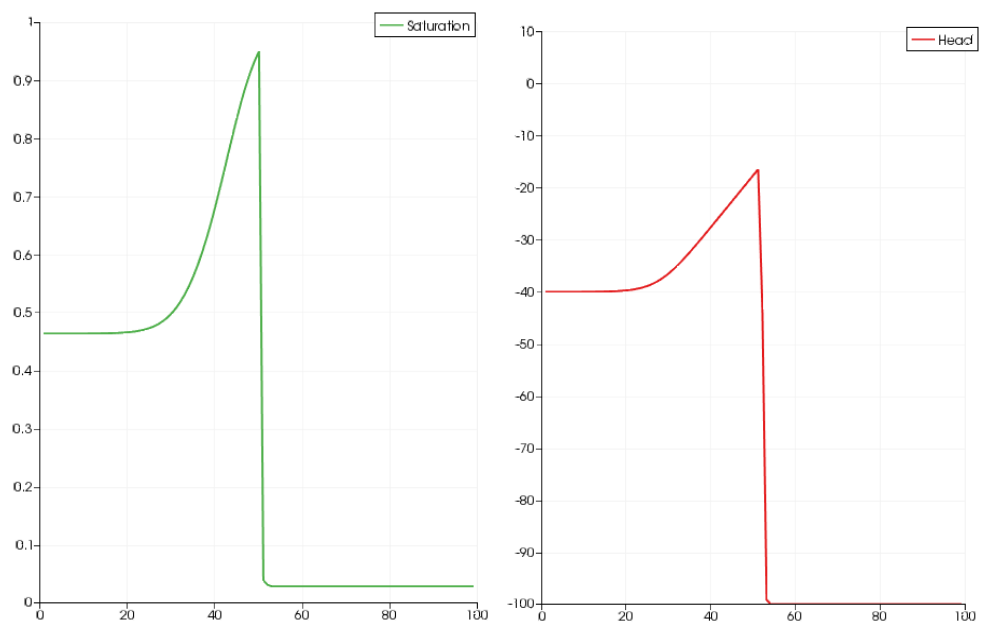


Рис. 3: Накопление воды на границе раздела. $T = 1.46$ суток

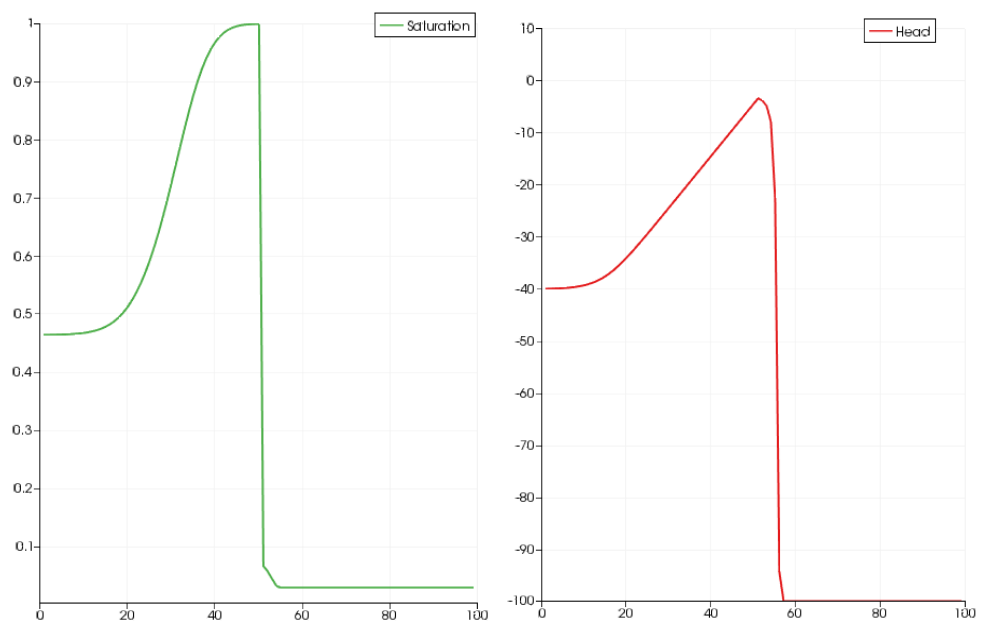


Рис. 4: Достижение полной насыщенности на границе. Начало протекания в гравий.
 $T = 2.45$ суток

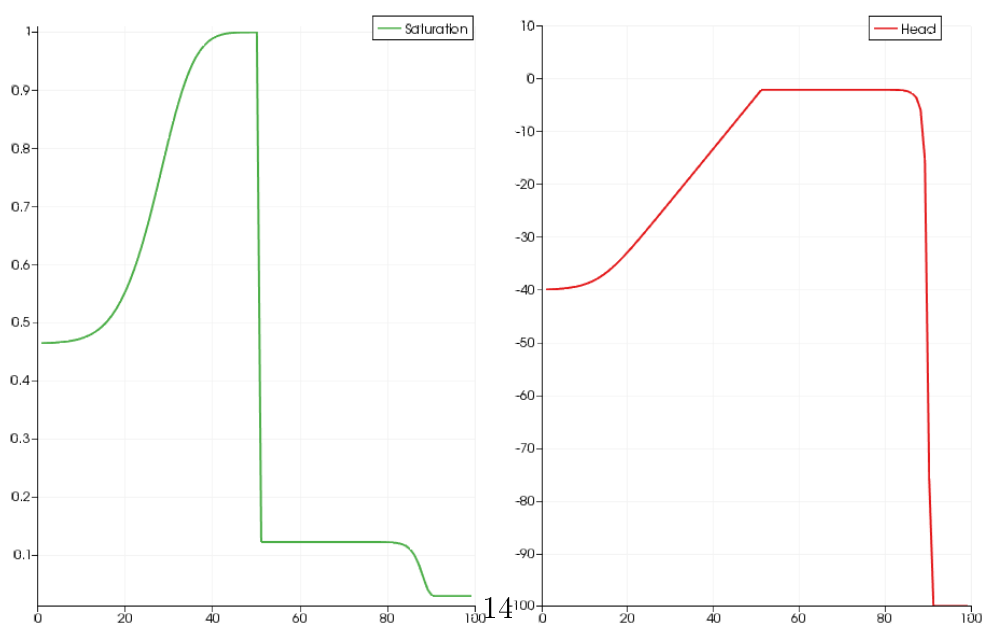


Рис. 5: Финальная картина

2.5 Выводы из изучения одномерных задач

Метод Ньютона оказался хорошей альтернативой модифицированному методу простой итерации для одномерных задач. Особенно заметно это для случая сухих сред, где полезной оказывается техника переключения главных переменных. Хорошие результаты метода Ньютона для сильно неоднородных сред дают основания предположить, что ускорение относительно ММПИ будет наблюдаться и в аналогичных трехмерных задачах.

3 Трёхмерный случай

3.1 Дискретизация уравнений

Для дискретизации уравнения Ричардса в программном комплексе GeRa применяются различные схемы метода конечных объёмов (МКО):

- традиционная линейная двухточечная схема,
- линейная многоточечная O -схема [8],
- нелинейная монотонная двухточечная схема [9].

Для коэффициента фильтрации K возможны следующие варианты аппроксимации на гранях ячеек:

- центральная (полусумма значений в соседних ячейках),
- противопотоковая (выбор значения из той ячейки, где выше напор),
- высокого разрешения.

Шаг по времени выбирается динамически. При хорошей сходимости шаг увеличивается в 1.5 раза, при отсутствии сходимости – делится в 2 раза. Пользователь может задать границы, в которых изменяется шаг по времени.

Уравнение записывается не для высоты всасывания, а для напора $h = \Psi - z$:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + S \cdot s_{stor} \cdot \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot (K(\theta) \nabla h) = Q \quad (26)$$

3.2 Тестирование

Приведенные ниже тесты проведены с использованием линейной двухточечной схемы МКО и противопотокового выбора коэффициента фильтрации. Шаг по времени подбирается программой в ходе расчетов, поэтому мы будем смотреть на итоговое время выполнения и количество шагов.

Сначала тестировалась одномерная задача, чтобы сравнить результаты с одномерным кодом, и ее трехмерный аналог. Далее рассматривалась задача о капиллярном барьере и пример задачи с распространением загрязнения из условного захоронения. На этих и некоторых других не включенных в текст работы задачах метод Ньютона с переключением переменных показал более быструю работу.

3.2.1 Задача Celia

Попробуем промоделировать ту же задачу, что и в одномерном случае. Возьмем сетку из 100 ячеек, максимальное количество итераций на шаге по времени – 50, максимально допустимый шаг по времени – 1 сутки.

	Время расчётов, с	Количество шагов по времени
ММПИ	0.22	1
h -Ньютон	5.67	184
Ньютон	0.12	1

Таблица 9: Celia, $T = 1$ сутки, шаг сетки $h = 1$ см

В целом результаты совпадают с ожидаемыми по итогам моделирования в одномерной программе.

Возьмем теперь сетку из 40 ячеек, максимальное количество итераций на шаге по времени снизим до 20, максимально допустимый шаг по времени снизим до 0.001 суток.

	Время расчётов, с	Количество шагов по времени
ММПИ	2.05	100
h -Ньютон	2.11	104
Ньютон	1.07	98

Таблица 10: Celia, $T = 1$ сутки, шаг сетки $h = 2.5$ см

Здесь все методы работали с примерно одинаковым шагом по времени, но метод Ньютона с переключением обошел остальные за счет меньшего количества итераций на шаге по времени.

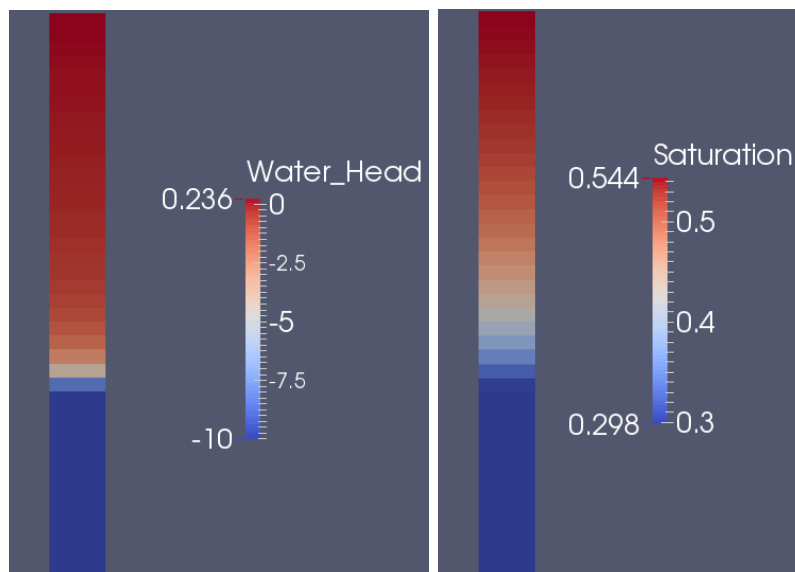


Рис. 6: Финальные значения напора и насыщенности. Celia, $T = 1$ сутки, шаг сетки $h = 2.5$ см, максимальный шаг по времени – 0.001 суток

3.2.2 Задача Celia в кубе

Перейдем к решению задач на трехмерных сетках. Для этого колонку заменим на куб со стороной 1 м и построим в нем гексаэдральную сетку с шагами 0.1 м по x и y и 100 слоями по z . Всего получится 10000 ячеек. Начальные и граничные условия совпадают с одномерным случаем. Максимальное количество итераций на шаге – 50, максимальный шаг по времени – 1 сутки.

	Время расчётов, с	Количество шагов по времени
ММПИ	9.3	1
Ньюتون	7.8	1

Таблица 11: Celia в кубе, $T = 1$ сутки, сетка из 10000 ячеек

Результаты подобны одномерному случаю. Совершалось то же количество шагов по времени. Метод Ньютона в напорной форме не рассматривался из-за сравнительно долгого времени работы.

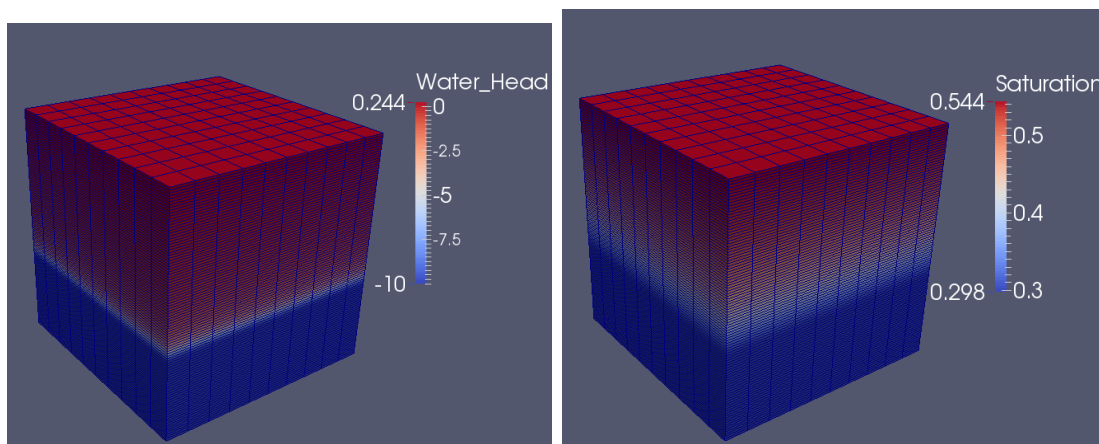


Рис. 7: Финальные значения напора и насыщенности. Celia в кубе, насыщенно-ненасыщенные условия, сетка 4000.

3.2.3 Задача о капиллярном барьере

Капиллярный барьер – это система из двух разнородных слоев почвы в ненасыщенном состоянии, препятствующая просачиванию жидкости сквозь себя. Верхний слой барьера состоит из мелкозернистого материала (песка), а нижний – из крупнозернистого (гравия). Такое строение барьера означает резкий перепад в свойствах сред, особенно в случае слабой насыщенности. Тесты с капиллярными барьерами используются в гидрогеологических программах для проверки их работы в подобных условиях сильной неоднородности сред и образования зоны полной насыщенности в расчетной области.

Для верхней границы барьера задается поток, для остальных границ заданы условия непротекания.

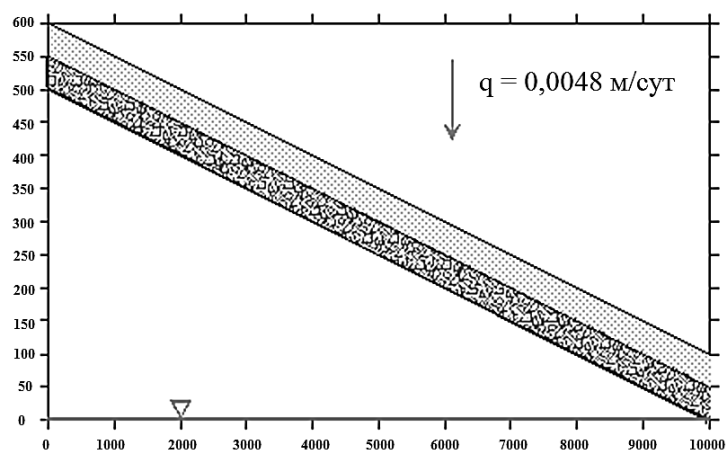


Рис. 8: Постановка задачи о капиллярном барьере. Расстояния указаны в метрах.

В области строится гексаэдральная сетка из 800 ячеек. Каждый из двух слоев разбивается на два подслоя, в подслоях, прилегающих к границе раздела сред, сетка является более мелкой.

Эта задача требует много вычислений даже при моделировании на короткий срок – 1 сутки. При расчетах было установлено ограничение на количество итераций на шаге по времени в 50 итераций.

	Время расчётов, с	Количество шагов по времени
ММПИ	2200.0	20480
h -Ньютон	4078.3	20480
Ньютон	2.1	10

Таблица 12: Капиллярный барьер, моделирование на срок 1 сутки

На задаче о капиллярном барьере метод Ньютона с переключением переменных за счет возможности выбора большего шага по времени показал очень значительное ускорение по сравнению с остальными методами, которые к концу расчетов использовали шаги порядка 10^{-13} суток. Видно, что это преимущество возникает за счет не просто использования метода Ньютона, а именно возможности переключения переменных. Метод Ньютона в напорной форме работал практически точно так же, как и метод простой итерации, но за счет более тяжелых итераций занял еще больше времени.

С помощью метода Ньютона с переключением переменных можно провести моделирование на 15 суток, чтобы наблюдать эффект прорыва барьера. Расчеты занимают 257.4 с, совершается 1802 шага по времени.

Можно видеть, что вблизи границы раздела сред возникла зона полной насыщенности. Главные переменные для ячеек этой зоны переключились на напор.

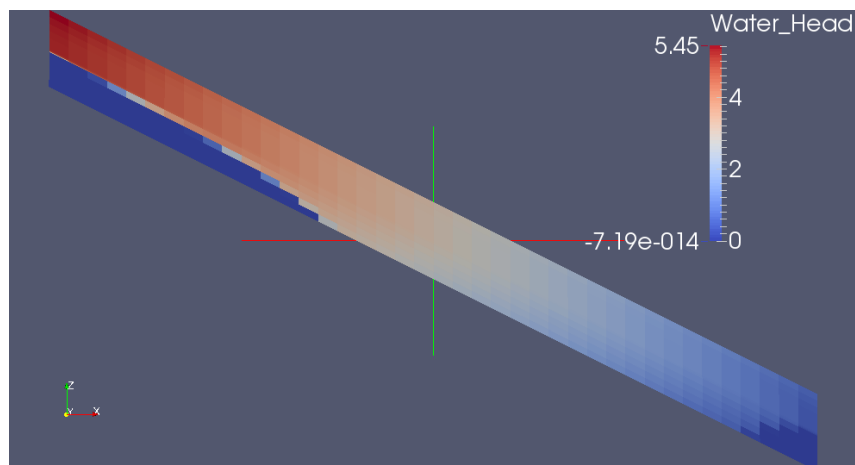


Рис. 9: Напор после 15 суток для капиллярного барьера

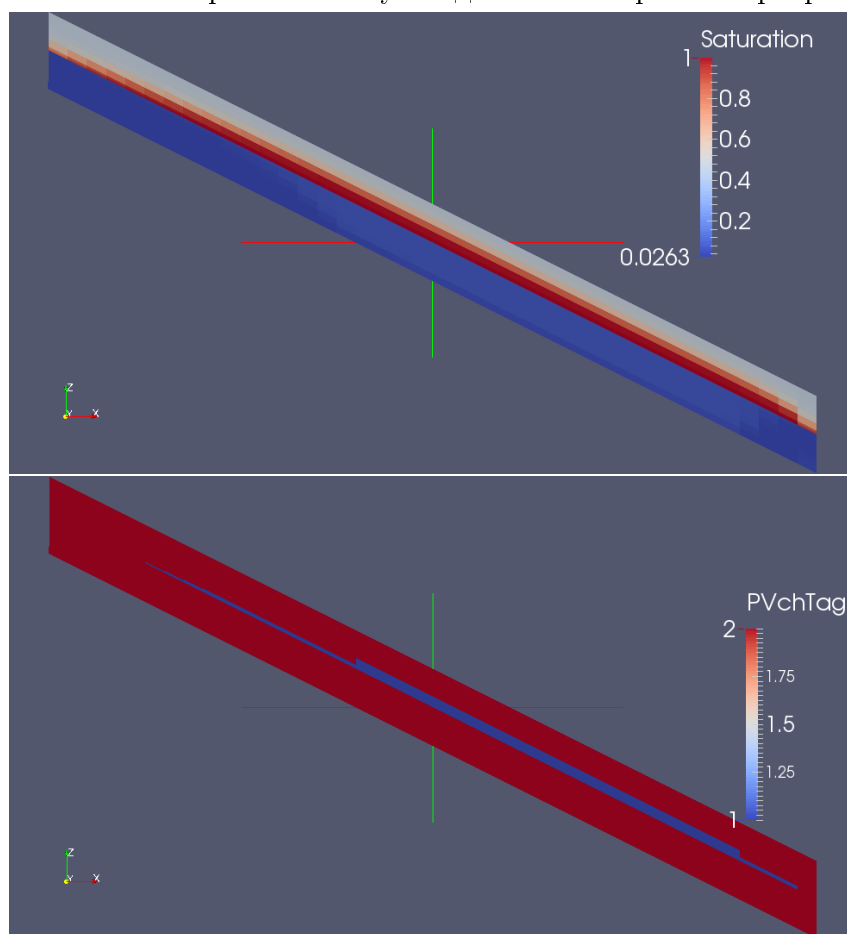


Рис. 10: Насыщенность и главные переменные (1 – напор, 2 – влагосодержание) после 15 суток для капиллярного барьера

3.2.4 Распространение загрязнения в неоднородной зоне аэрации

Рассматривается срез почвы, состоящей из песка с неоднородностью из слабо проницаемых пылеватых грунтов. Расчетная область имеет размеры $6,47 \times 4,06$ м. В левом и правом нижних углах задан напор $h = -4,5$ м. На отметке $-4,5$ м давление нулевое, и выше этой отметки начальные давления заданы гидростатическими. На верхней границе задано поток $0,01$ м/сут. Углубление на верхней границе можно рассматривать как хранилище отходов, там задана концентрация примеси 1000 мг/л. В остальных частях верхней границы концентрация нулевая.

В области строится сетка из 5384 треугольных призм. Проводится моделирование на срок 110 суток с максимальным шагом 1 сутки. Максимальное количество итераций на шаге по времени – 20, итерации проводятся до понижения начальной невязки в 1000 раз или до достижения ею значения 10^{-7} .

	Время расчётов, с	Количество шагов по времени
ММПИ	450	890
Ньютон	89	150

Таблица 13: Расчет задачи распространения примеси в неоднородной зоне аэрации, $T = 110$ суток.

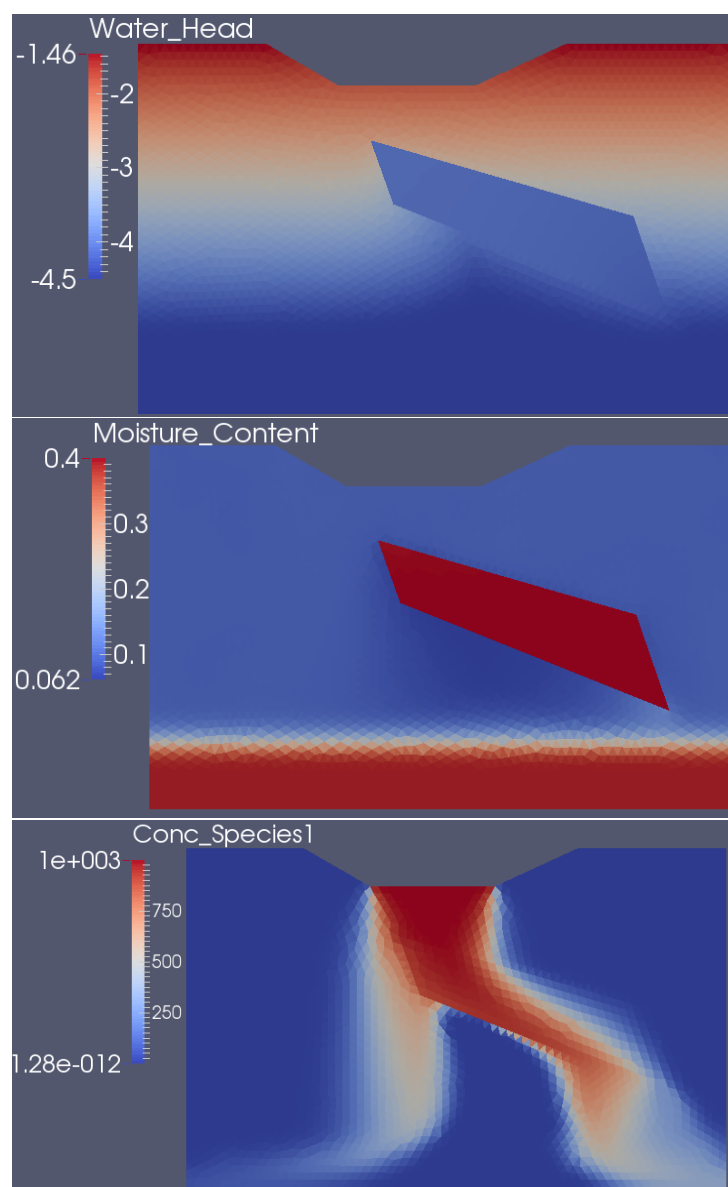


Рис. 11: Напор, влагосодержание и концентрация примеси, $T = 110$ суток.

Зона пылеватых грунтов выступает коллектором потока примеси, образующийся на ее нижней границе капиллярный барьер уводит поток вправо. Так как в области

имеются зоны как низкой, так и высокой насыщенности, здесь хорошо тестировать работу техники переключения переменных. Хотя были выставлены не очень жесткие условия остановки нелинейных решателей, метод Ньютона с переключением обошел ММПИ примерно в 5 раз.

4 Заключение

Изучено моделирование ненасыщенной фильтрации. Рассмотрены формы записи уравнения ненасыщенной фильтрации и постановки одномерных задач. Рассмотрены два подхода к дискретизации одномерных задач ненасыщенной фильтрации: метод конечных разностей и метод конечных объемов с различными вариантами аппроксимации коэффициента фильтрации. Для решения получающихся систем нелинейных алгебраических уравнений рассмотрены два основных метода: модифицированный метод простой итерации и метод Ньютона.

Метод Ньютона с переключением переменных является хорошей заменой для модифицированного метода простой итерации при моделировании орошения некоторых сухих сред, в том числе неоднородных. На таких задачах он демонстрирует как более быструю сходимость, так и возможность брать большие шаги по времени. Такие качества определяются в том числе применением техники переключения главных переменных.

Обозначенные методы реализованы в программе для численного моделирования одномерной ненасыщенной фильтрации. Метод Ньютона с переключением переменных реализован для трехмерного случая в программном комплексе GeRa. С помощью этого метода удалось существенно ускорить расчеты при решении ряда задач ненасыщенной фильтрации.

Список литературы

- [1] И.В. Капырин, В.А. Иванов, Г.В. Копытов, С.С. Уткин. *Интегральный код GeRa для обоснования безопасности захоронения РАО*
Горный журнал, 2015, №10, с.44-50.
- [2] И.В. Капырин, Ф.В. Григорьев, И.Н. Коньшин. *Геомиграционное и геофильтрационное моделирование в расчетном коде GeRa.*
Суперкомпьютерные дни в России: труды международной конференции (26–27 сентября 2016 г., г. Москва), М.: Изд-во МГУ, 2016, с. 133–139
<http://2016.russianscdays.org/files/pdf16/133.pdf>
- [3] H.-J.G. Diersh, P. Perrochet. *On the primary variable switching technique for simulating unsaturated-saturated flows*
Advances in Water Resources, Volume 23, Issue 3, Pages 271–301, 1999.
- [4] C. Paniconi, M. Putti. *A comparison of Picard and Newton iteration in the numerical solution of multidimensional variably saturated flow problems*
Water Resources Research 30(12):3357-3374, 1994.
- [5] K. Lipnikov, D. Moulton, D. Svyatskiy. *New preconditioning strategy for Jacobian-free solvers for variably saturated flows with Richards' equation*
Advances in Water Resources, Volume 24, Pages 11-22, 2016.
- [6] M. Celia, E. Bouloutas. *A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation*
Water Resources Research, Volume 26, No.7, Pages 1483-1496, 1990.
- [7] J. Simůnek, R. van Genuchten and M. Šejna. *The HYDRUS-1D Software Package for Simulating the Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably Saturated Media.*
2005.
- [8] I. Aavatsmark, T. Barkve, O. Boe, and T. Mannseth. *Discretization on unstructured grids for inhomogenous, anisotropic media. Part I: Derivation of the methods.*
SIAM J. Sci. Comput. Vol. 19, No. 5, pp. 1700-1716, September 1998
- [9] 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.
- [10] https://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/cpp_src/umfpack/umfpack.html
- [11] Advanced numerical instruments 2D: adaptive meshing, FE methods, solvers
<https://sourceforge.net/projects/ani2d/>