

# **MÉTODO DE DESCOMPOSICIÓN DE DOMINIO APLICADO A FLUJO SUBTERRÁNEO**

**Grupo de Geofísica Matemática y Computacional,  
Instituto de Geofísica,**

**Universidad Nacional Autónoma de México,**

**Guillermo de J. Hernández García**

**en el grupo con:**

**Graciela Herrera Z., Marian Lemus G.,**

**Iván Contreras T., Ismael Herrera R.**

# PROPÓSITO DE ESTA CHARLA

- Los algoritmos del Espacio de Vectores Derivados, DVS, son muy eficientes para la aplicación de software altamente paralelo a la solución de las ecuaciones diferenciales parciales (PDE), o sistemas de tales ecuaciones.
- Como ilustración de su aplicabilidad presentamos su aplicación a un software bien conocido y ampliamente usado: MODFLOW

# MODFLOW

## INFORMACIÓN GENERAL

- Modelo **Modular** de flujo de agua subterránea,
- Código abierto y licencia libre del USGS
- Desarrollado en lenguaje de programación FORTRAN 90,
- Internacionalmente aplicado por los hidrogeólogos.

# MODFLOW

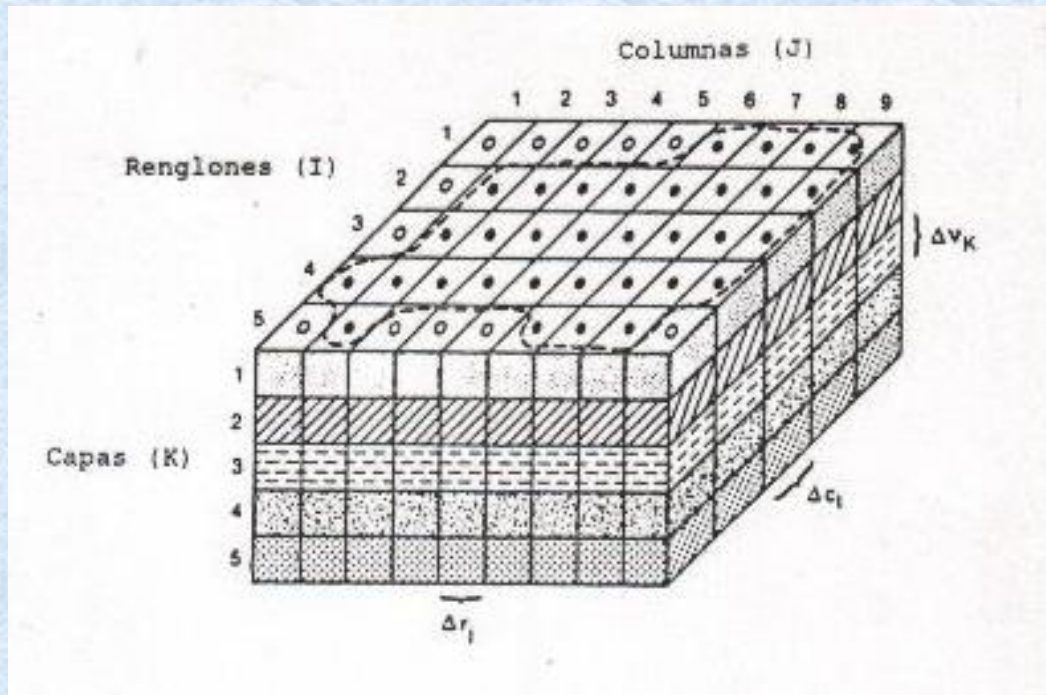
El flujo tridimensional de agua subterránea de densidad constante a través de un medio poroso heterogéneo y anisotrópico es gobernado por la ecuación diferencial parcial siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} - R$$



# MODFLOW

## DESCOMPOSICIÓN DEL DOMINIO EN CELDAS



**Figura. Un acuífero hipotético discretizado.**  
(tomado de McDonald and Harbaugh, 1988.)

### EXPLANATION

--- AQUIFER BOUNDARY

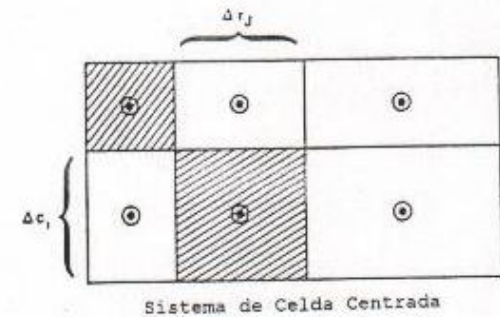
● ACTIVE CELL

○ INACTIVE CELL

$\Delta r_j$  DIMENSION OF CELL ALONG THE ROW DIRECTION—  
Subscript (j) indicates the number of the column

$\Delta c_i$  DIMENSION OF CELL ALONG THE COLUMN DIRECTION—  
Subscript (i) indicates the number of the row

$\Delta v_k$  DIMENSION OF CELL ALONG THE VERTICAL DIRECTION—  
Subscript (k) indicates the number of the layer



# MODFLOW

## ECUACIONES EN DIFFERENCIAS FINITAS

De acuerdo con la ecuación de continuidad, que expresa el equilibrio de flujo en una celda, la suma de todos los flujos desde y hacia cada celda debe ser igual a la tasa de cambio del almacenamiento en esa misma celda (Todd. 1980),

$$\sum Q_i = S_s \frac{\Delta h}{\Delta t} \Delta V \quad (1.1)$$

$Q_i$  = es el flujo hacia o desde la celda [ $L^3 T^{-1}$ ]

$S_s$  = es el volume de agua que puede ser inyectado por unidad de volume del material acuífero por unidad de cambio en la carga [ $L^{-1}$ ]

$\Delta V$  = es el volume de la celda [ $L^3$ ]

$\Delta h$  = es el cambio de la carga en un interval de tiempo de longitud  $\Delta t$  [L]

# MODFLOW

## CELDA ADYACENTES A LA CELDA $i, j, k$

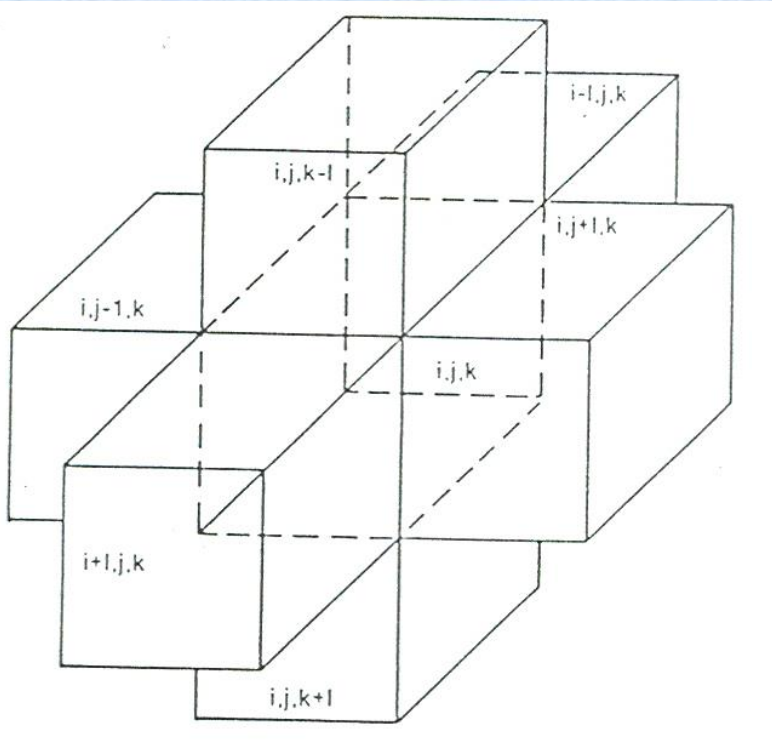


Figura. Índices de las seis celda adyacentes que rodean la celda  $i, j, k$  (oculta). (Modificado de McDonald y Harbaugh, 1988.)

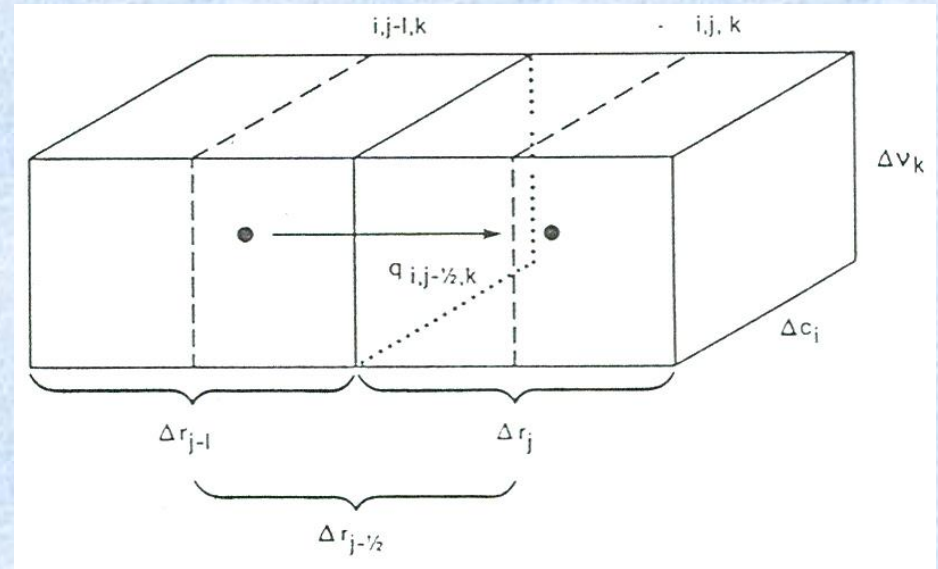


Figura. Flujo en la celda  $i, j, k$  de la celda  $i, j-1, k$ . (modificado de McDonald y Harbaugh, 1988).



# MODFLOW

## LEY DE DARCY Y CONDUCTANCIA

El flujo a la celda  $i, j, k$  en la dirección del renglón, desde la celda  $i, j-1, k$  (figura) se da, por ley de Darcy,

$$\text{desde } i, j-1, k \quad q_{i,j-\frac{1}{2},k} = KR_{i,j-\frac{1}{2},k} \Delta c_i \Delta v_k \frac{h_{i,j-1,k} - h_{i,j,k}}{\Delta r_{j-\frac{1}{2}}} \quad (1.2)$$

donde:  $KR_{i,j-1/2,k}$  es la conductividad hidráulica en la dirección del renglón entre los nodos  $i,j,k$  y  $i,j-1,k$  [L T<sup>-1</sup>].

$$\text{desde } i, j+1, k \quad q_{i,j+\frac{1}{2},k} = KR_{i,j+\frac{1}{2},k} \Delta c_i \Delta v_k \frac{h_{i,j+1,k} - h_{i,j,k}}{\Delta r_{j+\frac{1}{2}}} \quad (1.3)$$

$$\text{desde } i+1, j, k \quad q_{i+\frac{1}{2},j,k} = KC_{i+\frac{1}{2},j,k} \Delta r_j \Delta v_k \frac{h_{i+1,j,k} - h_{i,j,k}}{\Delta c_{i+\frac{1}{2}}} \quad (1.4)$$

$$\text{desde } i-1, j, k \quad q_{i-\frac{1}{2},j,k} = KC_{i-\frac{1}{2},j,k} \Delta r_j \Delta v_k \frac{h_{i-1,j,k} - h_{i,j,k}}{\Delta c_{i-\frac{1}{2}}} \quad (1.5)$$

$$\text{desde } i, j, k+1 \quad q_{i,j,k+\frac{1}{2}} = KV_{i,j,k+\frac{1}{2}} \Delta r_j \Delta c_i \frac{h_{i,j,k+1} - h_{i,j,k}}{\Delta v_{k+\frac{1}{2}}} \quad (1.6)$$

$$\text{desde } i, j, k-1 \quad q_{i,j,k-\frac{1}{2}} = KV_{i,j,k-\frac{1}{2}} \Delta r_j \Delta c_i \frac{h_{i,j,k-1} - h_{i,j,k}}{\Delta v_{k-\frac{1}{2}}} \quad (1.7)$$



# MODFLOW

## LEY DE DARCY Y CONDUCTANCIA

La notación se puede simplificar mediante la combinación de las dimensiones de la rejilla y conductividad hidráulica en una única constante, la “conductancia hidráulica” o, más simplemente, la "conductancia". Por ejemplo

$$CR_{i,j-\frac{1}{2},k} = \frac{KR_{i,j-\frac{1}{2},k} \Delta c_i \Delta v_k}{\Delta r_{j-\frac{1}{2}}} [L^2 T^{-1}] \quad (1.8)$$

Al sustituir la conductancia de ecuación 1.8 en ecuación 1.2

$$q_{i,j-\frac{1}{2},k} = CR_{i,j-\frac{1}{2},k} (h_{i,j-1,k} - h_{i,j,k}) \quad (1.9)$$

Similarmente

$$q_{i,j+\frac{1}{2},k} = CR_{i,j+\frac{1}{2},k} (h_{i,j+1,k} - h_{i,j,k}) \quad (1.10)$$

$$q_{i-\frac{1}{2},j,k} = CC_{i-\frac{1}{2},j,k} (h_{i-1,j,k} - h_{i,j,k}) \quad (1.11)$$

$$q_{i+\frac{1}{2},j,k} = CC_{i+\frac{1}{2},j,k} (h_{i+1,j,k} - h_{i,j,k}) \quad (1.12)$$

$$q_{i,j,k-\frac{1}{2}} = CV_{i,j,k-\frac{1}{2}} (h_{i,j,k-1} - h_{i,j,k}) \quad (1.13)$$

$$q_{i,j,k+\frac{1}{2}} = CV_{i,j,k+\frac{1}{2}} (h_{i,j,k+1} - h_{i,j,k}) \quad (1.14)$$

# MODFLOW

## ECUACIONES EN DIFERENCIAS FINITAS

En cada celda:

$$\begin{aligned}
 & CV_{i,j,k-\frac{1}{2}} h_{i,j,k-1}^m + CC_{i-\frac{1}{2},j,k} h_{i-1,j,k}^m + CR_{i,j-\frac{1}{2},k} h_{i,j-1,k}^m + \\
 & \left( -CV_{i,j,k-\frac{1}{2}} - CC_{i-\frac{1}{2},j,k} - CR_{i,j-\frac{1}{2},k} - CR_{i,j+\frac{1}{2},k} - CC_{i+\frac{1}{2},j,k} - CV_{i,j,k+\frac{1}{2}} + HCOF_{i,j,k} \right) h_{i,j,k}^m \\
 & + CR_{i,j+\frac{1}{2},k} h_{i,j+1,k}^m + CC_{i+\frac{1}{2},j,k} h_{i+1,j,k}^m + CV_{i,j,k+\frac{1}{2}} h_{i,j,k+1}^m \\
 & = RHS
 \end{aligned}$$

$$HCOF_{i,j,k} = P_{i,j,k} - \frac{SC1_{i,j,k}}{t_m - t_{m-1}}$$

$$RHS_{i,j,k} = Q_{i,j,k} - \frac{SC1_{i,j,k} h_{i,j,k}^{m-1}}{t_m - t_{m-1}}$$

$$SC1_{i,j,k} = SS_{i,j,k} \Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k$$

# MODFLOW

## $[A][h]=[q]$

$$\begin{bmatrix}
 E_1 & F_1 & 0 & 0 & H_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 D_2 & E_2 & F_2 & & & H_2 & & & & & & & S_2 & & & & & & & & & & 0 \\
 0 & D_3 & E_3 & F_3 & & & H_3 & & & & & & & S_3 & & & & & & & & & 0 \\
 0 & & D_4 & E_4 & F_4 & & & H_4 & & & & & & & S_4 & & & & & & & & 0 \\
 B_5 & & & D_5 & E_5 & F_5 & & & H_5 & & & & & & & S_5 & & & & & & & 0 \\
 0 & B_6 & & & D_6 & E_6 & F_6 & & & H_6 & & & & & & & S_6 & & & & & & 0 \\
 0 & & B_7 & & & D_7 & E_7 & F_7 & & & H_7 & & & & & & & S_7 & & & & & 0 \\
 0 & & & B_8 & & & D_8 & E_8 & F_8 & & & H_8 & & & & & & & S_8 & & & & 0 \\
 0 & & & & B_9 & & & D_9 & E_9 & F_9 & & & H_9 & & & & & & & S_9 & & & 0 \\
 0 & & & & & B_{10} & & & D_{10} & E_{10} & F_{10} & & & & H_{10} & & & & & & S_{10} & & 0 \\
 0 & & & & & & B_{11} & & & D_{11} & E_{11} & F_{11} & & & & H_{11} & & & & & & S_{11} & 0 \\
 0 & & & & & & & B_{12} & & & D_{12} & E_{12} & F_{12} & & & & H_{12} & & & & & & S_{12} \\
 Z_{13} & & & & & & & & B_{13} & & & D_{13} & E_{13} & F_{13} & & & & H_{13} & & & & & & 0 \\
 0 & Z_{14} & & & & & & & & B_{14} & & & D_{14} & E_{14} & F_{14} & & & & H_{14} & & & & & 0 \\
 0 & & Z_{15} & & & & & & & & B_{15} & & & D_{15} & E_{15} & F_{15} & & & & H_{15} & & & 0 \\
 0 & & & Z_{16} & & & & & & & & B_{16} & & & D_{16} & E_{16} & F_{16} & & & & H_{16} & & 0 \\
 0 & & & & Z_{17} & & & & & & & & B_{17} & & & D_{17} & E_{17} & F_{17} & & & & H_{17} & 0 \\
 0 & & & & & Z_{18} & & & & & & & & B_{18} & & & D_{18} & E_{18} & F_{18} & & & & H_{18} \\
 0 & & & & & & Z_{19} & & & & & & & & B_{19} & & & D_{19} & E_{19} & F_{19} & & & H_{19} \\
 0 & & & & & & & Z_{20} & & & & & & & & & B_{20} & & D_{20} & E_{20} & F_{20} & & H_{20} \\
 0 & & & & & & & & Z_{21} & & & & & & & & & B_{21} & & D_{21} & E_{21} & F_{21} & 0 \\
 0 & & & & & & & & & Z_{22} & & & & & & & & & B_{22} & & D_{22} & E_{22} & F_{22} \\
 0 & & & & & & & & & & Z_{23} & & & & & & & & & & B_{23} & & D_{23} & E_{23} & F_{23} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Z_{24} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B_{24} & 0 & 0 & D_{24} & E_{24}
 \end{bmatrix}
 \times
 \begin{bmatrix}
 h_1 \\
 h_2 \\
 h_3 \\
 h_4 \\
 h_5 \\
 h_6 \\
 h_7 \\
 h_8 \\
 h_9 \\
 h_{10} \\
 h_{11} \\
 h_{12} \\
 h_{13} \\
 h_{14} \\
 h_{15} \\
 h_{16} \\
 h_{17} \\
 h_{18} \\
 h_{19} \\
 h_{20} \\
 h_{21} \\
 h_{22} \\
 h_{23} \\
 h_{24}
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 q_1 \\
 q_2 \\
 q_3 \\
 q_4 \\
 q_5 \\
 q_6 \\
 q_7 \\
 q_8 \\
 q_9 \\
 q_{10} \\
 q_{11} \\
 q_{12} \\
 q_{13} \\
 q_{14} \\
 q_{15} \\
 q_{16} \\
 q_{17} \\
 q_{18} \\
 q_{19} \\
 q_{20} \\
 q_{21} \\
 q_{22} \\
 q_{23} \\
 q_{24}
 \end{bmatrix}$$

Correspondencia entre ecuaciones en diferencias finitas y la ecuación matricial  
para una rejilla de tres renglones, cuatro columnas y dos capas

# ALGORITMOS DVS

- Matrices locales fueron construidos localmente y en paralelo
- En el límite interior, para nodos contiguos, se aplican algoritmos para los parámetros y valores de intercambio



# METODO **DVS** APLICADO A MODFLOW

- Implementación de ruta óptima,
- El código implementado soluciona problemas de elasticidad,
- escrito en C++, programación orientada a objetos
- MPI, topología virtual cartesiana

# MODFLOW

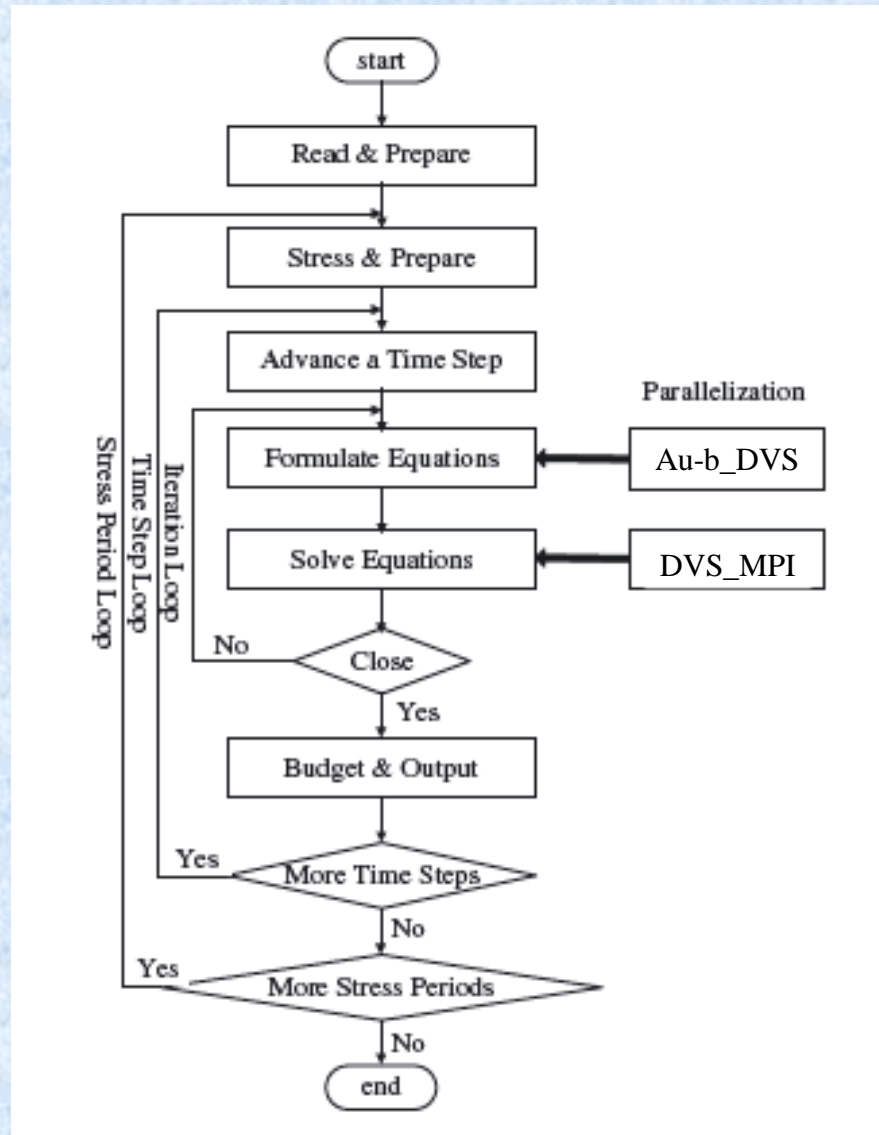
## PARALELIZACIÓN

- Utilizando MPI
  - Inicializado en MAIN
  - Paralelización en PCG
- modificado:
  - Subrutinas “Read and Prepare”, RP
  - Subrutinas “formulate”, FM
  - Paquete “Solver”, PCG

## Topología virtual cartesiana MPI

<b>0</b> (0,0)	<b>1</b> (0,1)	<b>2</b> (0,2)	<b>3</b> (0,3)
<b>4</b> (1,0)	<b>5</b> (1,1)	<b>6</b> (1,2)	<b>7</b> (1,3)
<b>8</b> (2,0)	<b>9</b> (2,1)	<b>10</b> (2,2)	<b>11</b> (2,3)
<b>12</b> (3,0)	<b>13</b> (3,1)	<b>14</b> (3,2)	<b>15</b> (3,3)

# MODFLOW: DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROGRAMA PARA SIMULAR FLUJO DE AGUA SUBTERRÁNEA EN PARALELO



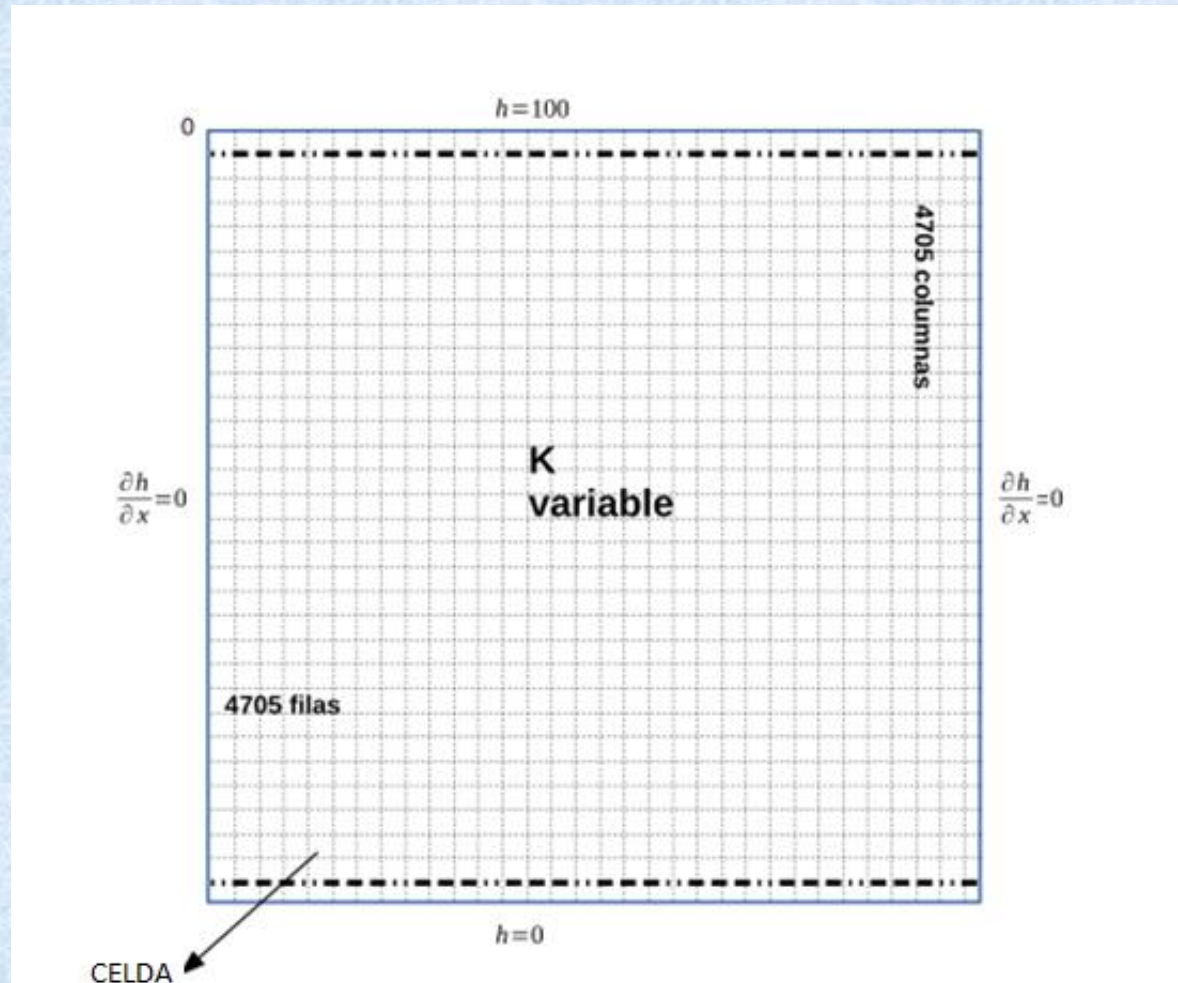


## DVS: Modos de ejecución

- Relación funcional entre dos programas
  - Como una ejecución independiente: un nuevo código de modelo para cada problema a resolver
  - Como una biblioteca para ser utilizado para un código externa: llama a un código existente para resolver la ecuación de matriz
- Compilación de MODFLOW-subrutinas DVS
  - El programa principal en Modflow llamada a DVS como una biblioteca
  - Procesamiento previo del dominio para tener subdominios independientes para ejecutar en paralelo.

# EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

## Solución de estado estacionario



# RESULTADOS

La aceleracion relativa es dada por

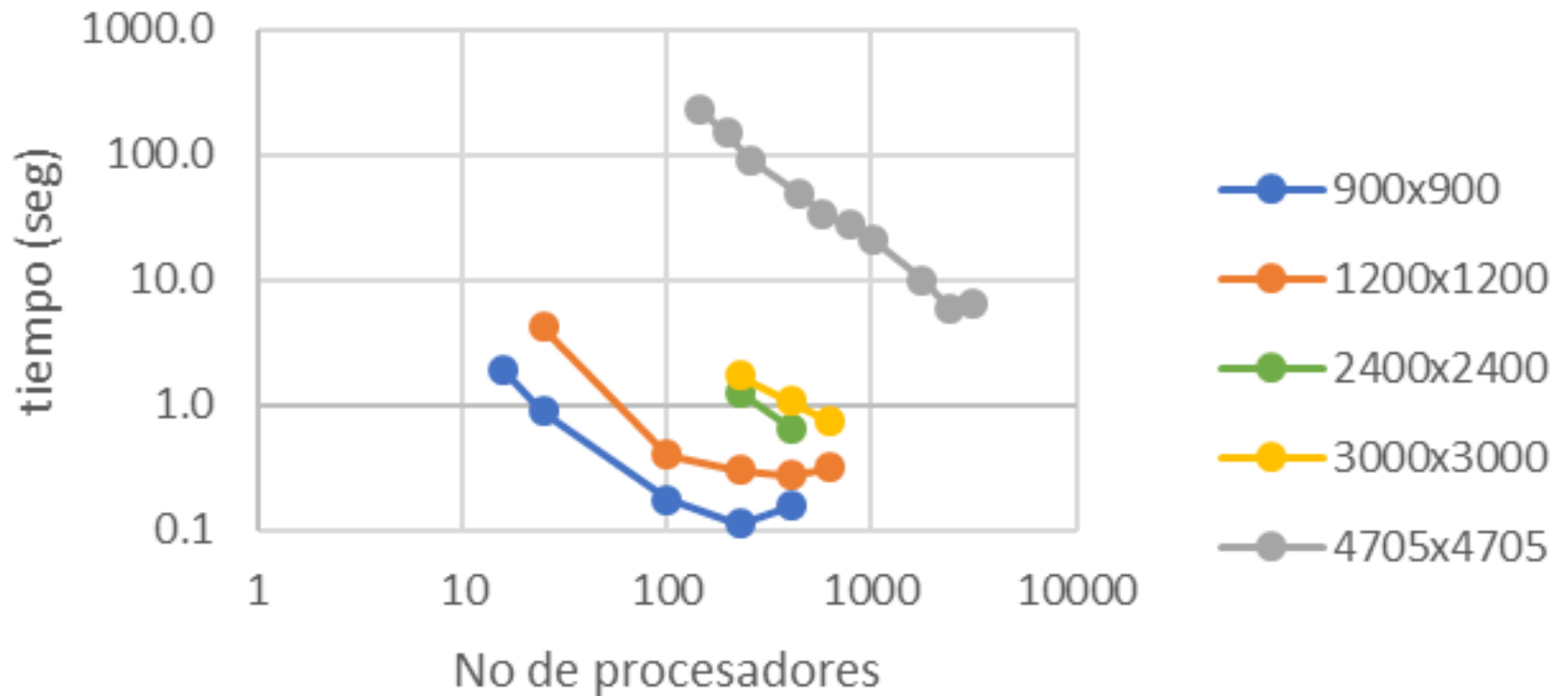
$$S_p^{p'} = \frac{T_{p'}}{T_p}$$

La eficiencia relativa se define como

$$E_p^{p'} = \frac{p'}{p} S_p^{p'} = \frac{p'}{p} \frac{T_{p'}}{T_p}$$

## TIEMPO VERSUS PROCESADORES

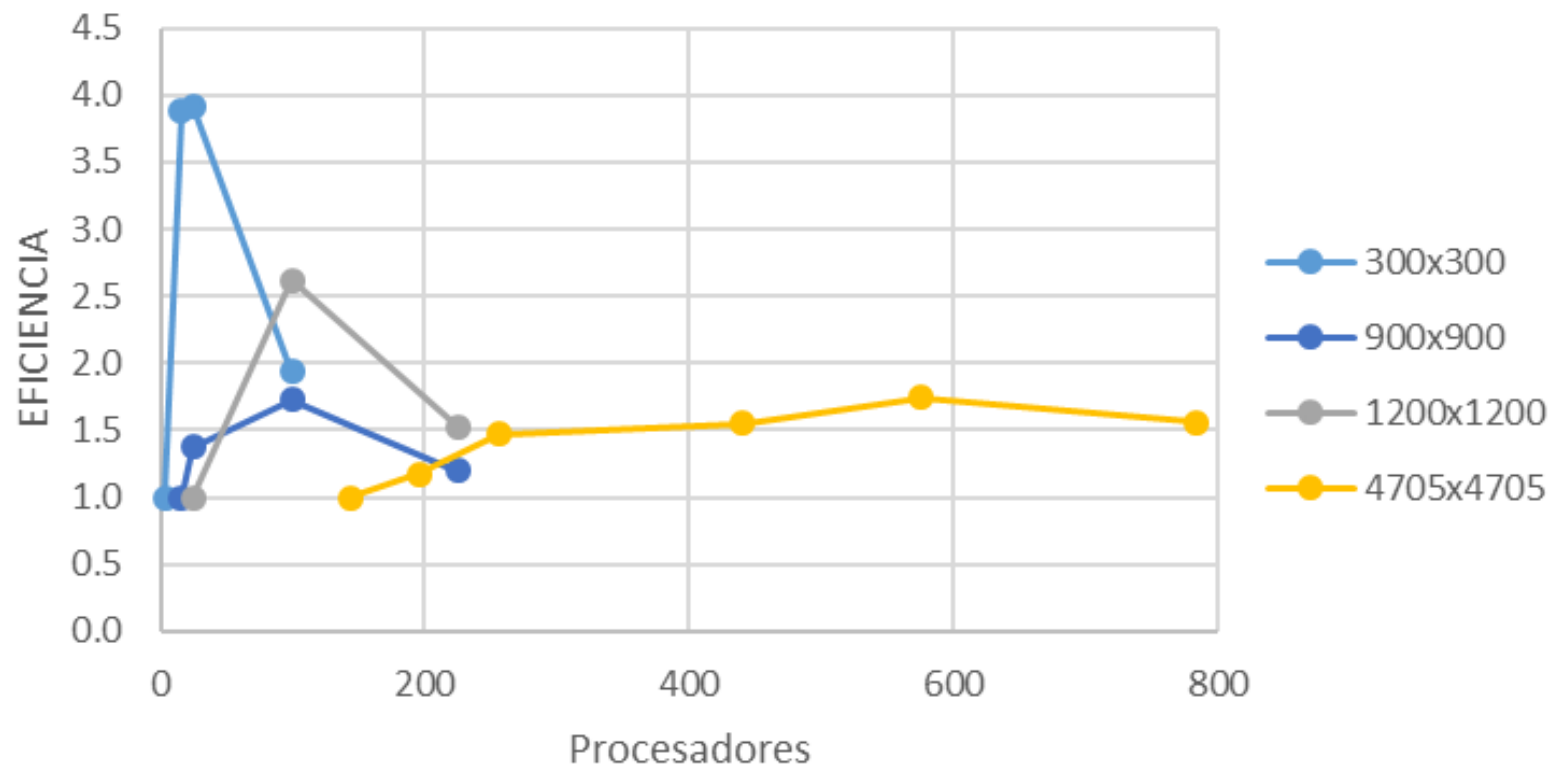
### Modflow DVS-BDDC



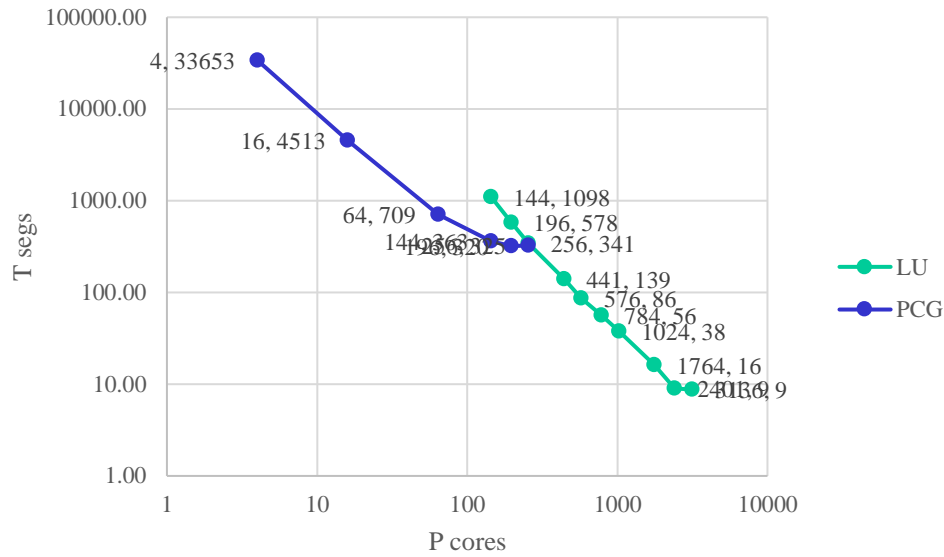


## EFICIENCIA VERSUS PROCESADORES

### Modflow DVS-BDDC



# MF-DVS 4705x4705



## MIZTLI PCG 1e-7

$$4705 \times 4705 = 22,137,025$$

Particiones en dominio	Particiones por subdom.	DoF/Sub	P	T (seg)	$S' = \frac{T_{p'}}{T_p}$	$E' = \frac{p'}{p} \frac{T_{p'}}{T_p}$
2x2	2353	5,536,609	4	33653.30	1.00	100.0
4x4	1177	1,385,329	16	4513.21	7.46	186.4
8x8	589	346,921	64	709.37	47.44	296.5
12x12	393	154,449	144	362.50	92.84	257.9
14x14	337	113,569	196	319.72	105.26	214.8
16x16	295	87,025	256	325.11	103.51	161.7

# CONCLUSIONES

- El método DVS trabaja en matrices simétricas, no simétricas e indefinidas y la formulación de tales métodos se ha desarrollado
- Este enfoque produce matriz unificadas simple, con expresiones, en términos de una matriz generalizada de Schur complemento.
- Aplicando este método al flujo y transporte en medios porosos permite para obtener eficaz paralelización de las ecuaciones que gobiernan en embalses con advección dominante.
- Formulaciones de DVS permiten para desarrollar códigos que cumplen el paradigma de la DDM, es decir:

***“La solución de los problemas globales se obtiene sólo por la resolución de los problemas locales”.***

# Referencias

- Ismael Herrera, Luis M. de la Cruz, Alberto Rosas-Medina, Nonoverlapping Discretization Methods for Partial Differential Equations, Numerical Methods for Partial Differential Equations, published by Wiley Periodicals, Inc, pp 1427-1454, 2014. 26
- Harbaugh, A.W., 2005, [MODFLOW-2005, the U.S. Geological Survey modular ground-water model -- the Ground-Water Flow Process](#): U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6-A16.
- Hill, Mary C., Preconditioned conjugate-gradient 2 (PCG2), a computer program for solving ground-water flow equations: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 90-4048, 43 p.