Proyecto semilla

Reporte de avances

Para el 2016 se solicitaron recursos para dos proyectos que se reportan en forma separada.

Titulo: Ensamble Suavizado implementado en paralelo con aplicaciones a problemas de agua subterránea.

Resumen:

La *asimilación de datos* es un proceso que une modelos de predicción y mediciones usando los beneficios de ambas fuentes de información. Un método secuencial de *asimilación de datos*, se llama *filtro de Kalman Ensamblado* (*EnKF* por sus siglas en inglés), y fue diseñado para resolver dos de los mayores problemas relacionados con el uso del *filtro de Kalman extendido* (*EKF por sus siglas en inglés*) con dinámica no–lineal en estados de espacio grandes, es decir, el uso de un esquema cerrado de aproximación y los enormes requerimientos computacionales asociados con el almacenamiento y la posterior integración de la matriz de covarianza del error. El método de *Ensamble Suavizado (ES)* es un método similar al *EnKF* que fue propuesto por Van Leeuwen y Evensen (1996). La diferencia entre el *EnKF* y el *ES* es, que el *EnKF* no proyecta información hacia atrás en el tiempo, y el *ES* hace estimaciones hacia atrás en el tiempo, dados los datos. Herrera (1998) propuso una versión del *ES* al que llamaremos *Ensamble Suavizado de Herrera* (*ESH*) para la optimización espacio-temporal de las redes de monitoreo del agua subterránea. En años recientes, este método se ha utilizado para la asimilación de datos y la estimación de parámetros en modelos de flujo y transporte del agua subterránea.

Este método utiliza la simulación estocástica o Monte Carlo, que consiste en generar realizaciones repetidas de la variable aleatoria considerada a través de un modelo de flujo y/o transporte, sin embargo, con frecuencia se requieren un gran número de corridas de los modelos para que los momentos converjan, por lo que una computadora serial puede requerir muchas horas de uso continuo dependiendo del problema que se trate y la capacidad de la computadora. Por este motivo se requiere paralelizar el proceso y que se lleve a cabo en un tiempo razonable. Para este trabajo se requiere de la paralelización de los algoritmos requeridos para el *ESH*. Dichos algoritmos están programados en *Fortran 90* en un software llamado *GWMC*, desarrollado por Herrera y colaboradores [1998]. Este software se modificó para ejecutarse en paralelo utilizando *scripts* y *MPI,* esta estrategia se aplicó al modelo de un acuífero simplificado en un dominio rectangular de una sola capa (Herrera y Pinder, 2005) utilizando el simulador Princeton Transport Code (PTC) obteniéndose una buena eficiencia (Leyva-Suarez, et al., 2015). En esta etapa del trabajo la estrategia de paralelización se probará con un problema real de mayores dimensiones, usando dos simulador diferentes, uno para flujo, MODFLOW, y otro para transporte, MT3D; con una malla de 123 columnas por 123 filas, donde la celda varía de 100 metros en el área de interés a 500 pies cerca del límite del dominio, con 9 capas tomando 768 pasos de tiempo, para considerar la

evolución de la pluma del contaminante en un intervalo de 30 años, el cual se divide en 6 períodos de 5 años cada uno (McLane Environmental, 2010).

Avances:

Para la paralelización de los algoritmos requeridos para el Ensamble Suavizado de Herrera (ESH), los cuales están programados en Fortran 90 en un software llamado GWMC (Ground Water Monte Carlo), desarrollado por Herrera y colaboradores [1998], se están utilizando las estrategias del desarrollo de script y MPI.

Antes de realizar la paralelización del GWMC, se debe corroborar que los diferentes programas utilizados se ejecuten de manera adecuada. Éstos son: Modflow, Mt3d y Sgsim. Se ha logrado compilar los programas y se ejecutaron de manera correcta, después de algunos problemas que se tuvieron que corregir. También se compiló y ejecutó el programa GWMC de manera correcta, y se efectuaron pruebas de 3, 200 y 1000 realizaciones.

Una vez hecho esto, se procedió a desarrollar la paralelización mediante un script en Python con mpi4py, pero aún no funciona correctamente.

Esta estrategia se está aplicando a un problema con una malla de 123 columnas por 123 filas, donde la celda varía de 100 metros (328.084 pies) en el área de interés a 152.4 metros (500 pies) cerca del límite del dominio, con 9 capas tomando 768 pasos de tiempo, para considerar la evolución de la pluma del contaminante en un intervalo de 30 años, el cual se divide en 6 períodos de 5 años cada uno.

PARALELIZACIÓN DE MODELOS EN AGUAS SUBTERRÁNEAS

Reporte de Avance

Resumen

MODFLOW es un simulador de flujo subterráneo que resuelve la ecuación general de flujo mediante el método de diferencias finitas. MODFLOW ha sido muy usado y probado por mucha gente. A pesar de la eficiencia de los métodos que usa MODFLOW para resolver los sistemas de ecuaciones que se generan a través del método, cuando se trata de problemas de gran escala, el tiempo de procesamiento se vuelve más largo y es necesaria mayor capacidad de memoria.

Una nueva metodología debida a I. Herrera -los algoritmos DVS, por sus siglas en inglés: derived-vector space-, ha sido recientemente introducida para tratar problemas de gran escala con menores tiempos de procesamiento. Los algoritmos DVS han demostrado tener la capacidad de producir eficiencias de paralelización muy altas. En base a lo anterior, en este trabajo hemos rediseñado algunas subrutinas de MODFLOW para adaptarlo a un

procesamiento en paralelo de un problema piloto. Las modificaciones al código de MODFLOW son tales que cumplen los requisitos que pide el código de DVS, siendo así dicho método, una opción de MODFLOW para resolver el problema de gran escala eficientemente de forma paralela.

Avances

Después de haber hecho el análisis del código de MODFLOW y del código DVS, al cual llamaremos DVS-Central, se hicieron las modificaciones correspondientes en MODFLOW para que corra en paralelo usando MPI y construya los vectores y matrices necesarias y las pase a DVS-Central para que este programa resuelva el sistema de ecuaciones. Asimismo, otros miembros del grupo modificaron DVS-Central para lograr una versión más general acorde a las necesidades de cualquier simulador, incluyendo MODFLOW. Se analizó el proceso a seguir para la compilación y ejecución conjunta de códigos en distintos lenguajes, en este caso C++ y Fortran 90. Se están haciendo pruebas del código en computadoras personales para luego llevarlo a Miztli.

Cálculos realizados:

Se utilizó Miztli para compilar y hacer pruebas con MODFLOW, MT3D y GWMC con corridas de flujo y transporte y simulación Monte Carlo.

Software utilizado: Fortran 90, Modflow, MT3D, Sgsim.

Recursos utilizados:

Recursos aprobados: 50000

Recursos consumidos: 326.44

Saldo: 49673.56

Lista de colaboradores:

Dra. Graciela Herrera Zamarrón

Dr. Luis Miguel De la Cruz Salas

M. en C. Esther Leyva Suárez

Lic. Marian Lemus García

Dr. Ismael Herrera Revilla

Dr. Iván Contreras Trejo

Dr. Guillermo Hernández García

Lista de artículos publicados: Ninguno

Lista de congresos nacionales e internacionales y participantes::

> **The 7th International Conference on Computational Methods.**
> **Derived Vector Space Method Applied to a Subsurface Flow Simulator**; Guillermo Hernandez-Garcia, Marian Lemus-Garcia, Graciela Herrera, Ismael Herrera. Berkeley, CA, EUA, agosto 2016.
> **Tercera Reunión Anual del Capítulo Mexicano de la Sociedad Internacional de Medios Porosos.**
> El método del Espacio de Vectores Derivados y su aplicación a un simulador de flujo subterráneo; Marian Lemus García, Graciela Herrera Zamarrón, Ismael Herrera Revilla, Guillermo Hernández García. Ciudad de México, octubre 2016.

Lista de alumnos graduados: La tesis de la alumna del programa de doctorado, Esther Leyva Suárez, tiene un 80% de avance y la tesis de la alumna del programa de maestría, Marian Lemus García, tiene un 75% de avance, ambas planean concluir sus tesis con los resultados obtenidos en Miztli durante el primer semestre de este año.