

甘肃北山大区域地下水流动模拟

董艳辉, 李国敏, 黎明

中国科学院地质与地球物理研究所工程地质力学重点实验室, 北京 100029

E-mail: lemondyh@mail.iggcas.ac.cn

2008-12-12 收稿, 2009-04-08 接受

中国科学院知识创新工程重要方向项目(编号: KZCX2-YW-116)和国家国防科技工业局高放废物地质处置研究资助项目

摘要 区域地下水流场刻画及分析是高放废物地质处置研究中的重要课题. 针对我国甘肃北山预选区面积大、水文地质条件复杂的难点, 将并行计算应用于大区域地下水流动模拟, 建立了面积近 10^5 km^2 、模型单元数达百万级的地下水模型. 通过高性能计算机对稳定流、非稳定流下的地下水流场进行模拟并进行了模型参数优化研究, 并根据多情景的模拟结果分析断层及不同补给条件对地下水流场产生的影响. 该研究为高放废物地质处置场址评价提供了科学依据.

关键词
大区域地下水
数值模拟
并行计算
甘肃北山

高放射性废物深部地质处置研究一直受到国际组织和世界各国的高度关注, 欧美等国在此方面已经取得了重要的进展. 我国因核电事业的飞速发展也急需解决高放废物的处置问题, 并以甘肃北山地区为预选区进行场址评价研究工作^[1,2]. 在天然系统内, 地下水的载体作用是放射性核素到达生物圈最有可能的因素, 因此在进行地质处置库场址特性评价时, 对区域地下水进行流动模拟以刻画多条件、多情景的地下水流场是一项重要的研究^[3]. 在美国 Yucca 山高放废物地质处置库选址研究中, 使用 MODFLOW^[4]模型建立的区域地下水模型 DVRFS^[5]为场址水文地质特征评价提供了重要支持. 然而, 由于大区域地下水流动涉及空间尺度较大(北山地区面积近 10^5 km^2), 水文地质条件复杂, 为了保证计算的精度必须使用大规模的地下水模型. 作为使用最广泛的地

下水流动模型, MODFLOW 在处理大尺度、高精度和高复杂性的大规模数值模拟问题时需要大量运行时间, 严重阻碍了研究工作的高效、顺利进行. 因此, 应用并行计算以解决计算能力不足、模拟计算效率低带来的难题, 已经成为地下水模拟研究的重要方向. 国外已有基于高性能计算机进行大规模地下水数值模拟并行计算的成功实例^[6,7], 而国内在这方面的研究还处于起步阶段.

本研究首先针对 MODFLOW 计算效率低的问题, 使用 OpenMP^[8]并行编程方法对其常用解法—Neuman 序列多项式的预处理共轭梯度法 (POLCG)^[9]进行改进, 实现其在共享存储计算机上的并行计算. 对 POLCG 的算法分析及计算耗时统计可以发现, 对全部网格单元进行的循环操作是影响计算时间最重要的部分. 作为共享存储计算平台的并行编程标准, OpenMP 采用线程级并行处理, 因此

非常适合这种循环级的并行操作. 并且 OpenMP 的 fork/join 并行模式(图 1)可以很好地支持增量并行, 对于一个串程序, 可以只在需要的部分进行并行操作^[10]. 增量并行非常适合于 POLCG 方法的并行化处理, 无需对整个 MODFLOW 程序重新并行编程, 只将其最耗时的模型全空间循环操作处理部分加入 OpenMP 并行指令就可得到可观的并行效果. 同时, 算法的完整保留使得并行程序与原程序的运行结果完全一致.

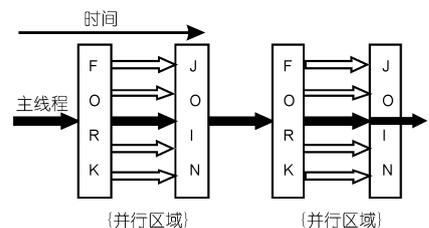


图 1 fork/join 并行模式

选取美国地质调查局地下水模型算例“TWRI_LARGE”进行并行

引用格式: 董艳辉, 李国敏, 黎明. 甘肃北山大区域地下水流动模拟. 科学通报, 2009, 54: 3790~3792

Dong Y H, Li G M, Li M. Numerical modeling of the regional ground water flow in Beishan area, Gansu Province. Chinese Sci Bull, 2009, 54: 3112-3115
doi: 10.1007/s11434-009-0344-7

性能测试及运算结果比较. 该模型水平方向剖分为 160 行、160 列, 垂向上剖分为 40 层, 共计 1024000 个模型单元. 并行测试计算机由 8 个处理器组成, 使用 GNU 的 Fortran 编译器进行并行程序的编译, 并行测试结果如表 1. 采用加速比, 即串行计算时间与并行计算时间的比值, 来进行并行性能分析. 对于该百万级单元的模型, 使用 8 个处理器并行计算可以达到 5.31 的加速比. 测试结果同时表明, 并行计算结果与串行计算相同, 在并行化的同时保证了计算结果的精度.

表 1 标准算例并行测试结果

串行计算时间/s	并行计算时间/s	加速比
3196.749	601.464	5.31

在并行计算的支持下进行甘肃北山区域地下水稳定流、非稳定流数值模拟, 以及水文地质参数优化、断层对流场影响分析等研究工作. 北山地区位于黑河流域的西北部(图 2), 具有典型的干旱区气候特征, 年均降水量 60~80 mm, 年均蒸发量 2900~3200 mm, 且集中在 4~9 月(图 3). 地下水模型范围包括北山地区及南部的花海盆地. 北山地区分布

大面积华力西期侵入的花岗岩, 其厚度可达数千米, 是处置库良好的围岩类型. 该地区地下水主要有松散岩类孔隙水、碎屑岩类孔隙-裂隙水和基岩裂隙水 3 种类型, 主要以潜水形式存在. 其补给来源为降水入渗, 蒸发为主要排泄方式, 其次为东部边界向黑河下游额济纳盆地及南部边界向花海盆地的侧向径流. 花海盆地位于疏勒河流域下游东部, 盆地东侧与黑河流域的金塔盆地相衔接. 区内蕴藏较为丰富的孔隙地下水, 主要补给来源于河道渗漏、祁连山前裂隙水侧向径流及降水入渗, 以及北山地下水侧向补给. 地下水的主要排泄方式是蒸发和人工开采[11,12].

针对大区域模型地形数据不足的问题, 使用 SRTM DEM 数据进行相关水文空间分析辅助地下水概念模型建立, 并使用该数据建立地下水空间模型. 高精度的地表高程刻画可以有效提高地下水模型潜水蒸发量计算准确性[13]. 地下水模型采用六面体矩形剖分, 平面离散为 798 行、665 列, 垂向上剖分为 3 层, 有效计算单

元共计 889011 个. 依据地质、水文地质条件进行模型的渗透系数、给水度、储水系数等参数分区; 并根据北山地区降水量表现出随地势升高而递增的规律性, 依据地表高程信息确定不同的降水补给区. 为使模型最大程度的反映真实的地下水系统, 使用 PEST[14]参数优化算法通过地下水水位限制条件进行模型参数优化, 以得到相对最优的参数组合.

分别使用串行和 8 个处理器并行计算的测试时间结果如表 2. 对于收敛时长 3589.579 s 的地下水稳定流模拟可得到最大 5.07 的加速比; PEST 参数优化计算需在其优化空间内循环调用 MODFLOW 进行水位计算, 因此计算时间达上百小时, 并行计算可得到 4.93 的加速比. 而对于使用 360 个时间步长的非稳定流计算(模拟期为 1 个水文年), 加速比达 5.01, 即每步长的计算时间可缩短 80% 以上. 由于高放废物处置要求达到万年以上的安全标准, 因此在进行万年甚至十万年尺度的非稳定流模拟时, 并行计算的优势是相当明显的.

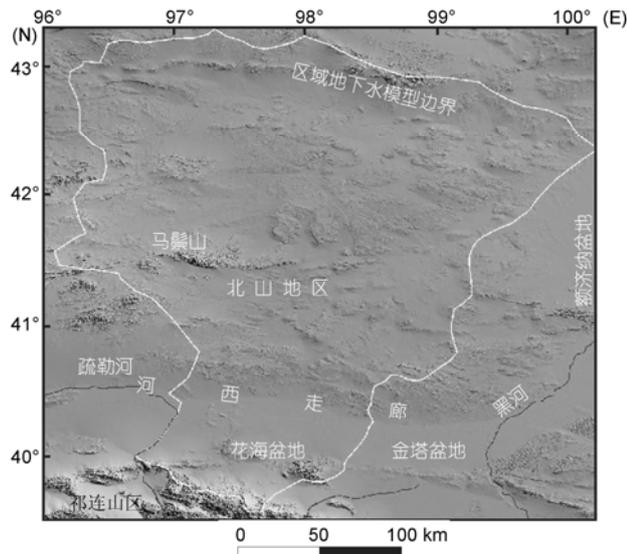


图 2 北山地区位置图

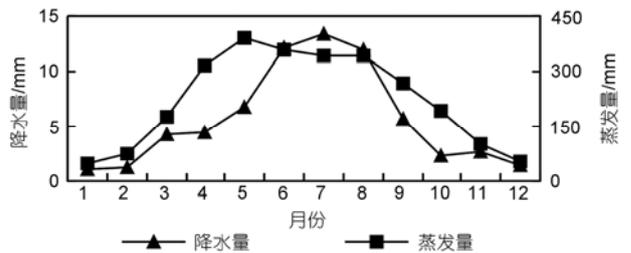


图 3 玉门镇多年月平均降水量、蒸发量

表 2 北山区域地下水模型并行测试结果

模拟类型	串行计算时间/s	并行计算时间/s	加速比
参数优化	632135.630	128229.261	4.93
稳定流	3589.579	707.738	5.07
非稳定流	448410.209	89440.374	5.01

通过高性能并行数值模拟得到了多情景下的地下水模拟结果,以下针对几个典型情景进行简要分析.使用多年平均数据进行稳定流计算的地下水流场如图4所示,在北部地区地下水总体由西向东流动、中部地区主要由西北流向东南或自北向南流动,而在南部地区总体为由南向北流动.为研究断层对地下水流场的影响,考虑区内主要断层构造进行情景模拟,与未考虑断层的流场

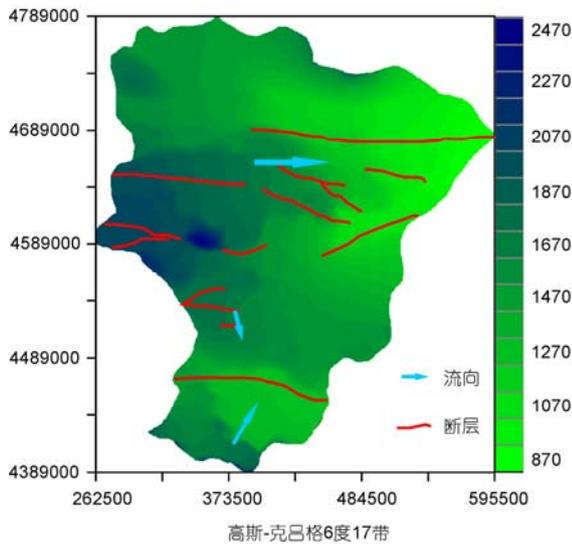


图4 稳定流模拟地下水流场

相比可以发现:断层对地下水的影响取决于多种因素,主要包括断层倾向与地下水流向的关系、断层走向与地下水流向的关系、断层与周围介质渗透能力的相对关系等;同时断层对流场的影响程度随距离断层远近不同而变化,随着距离增大总体呈减弱的趋势.使用多年月平均数据进行非稳定流模拟结果表明:地下水流场与稳定流计算的流场总体趋势一致,但由于降水和冰雪融水对研究区地下水位动态有着很强的控制作用,因此丰水期水位与枯水期水位有显著变化,变化幅度约为1~15 m.本模型的边界条件与参数设置等符合实际水文地质条件,模拟结果与实际观测孔水位动态拟合较好,能够客观反映研究区地下水流场状况及年内水位动态变

化.非稳定流情景下研究区地下水补给总量约 $1.725 \times 10^8 \text{ m}^3 \cdot \text{a}^{-1}$,排泄总量约 $1.748 \times 10^8 \text{ m}^3 \cdot \text{a}^{-1}$,均衡误差-1.33%,呈负均衡状态.地下水数值模拟并行计算成功应用于甘肃北山增进了对该地区区域地下水流动状况、循环规律的认识,并为大区域地下水模型研究提供了新的思路和方法.研究中建立的甘肃北山区域地下水模型为高放废物预选区的区域地下水循环、演化研究提供了平台,同时为后继开展粒子运移及核素迁移研究奠定了基础.随着区域地下水调查的深入及水文地质相关研究的开展,地下水模型将融合最新的地质、水文地质、气象、遥感等相关信息进行模型的优化,更加真实地刻画地下水流场,为区域水文地质特征评价提供可靠的科学依据.

研究中基于OpenMP开发的并行化MODFLOW模型高效地解决了大规模地下水数值模拟问题.该模型在完成与美国地质调查局的联合测试、优化后将正式发布,提供给全球的地下水模型研究者.高性能并行计算的应用将为大尺度、高分辨率、高复杂性的地下水数值模拟研究提供高效的支持.

参考文献

- 王驹,陈伟明,苏锐,等.高放废物地质处置及其若干关键科学问题.岩石力学与工程学报,2006,25:801—812
- 罗嗣海,钱七虎,周文斌,等.高放废物深地质处置及其研究概况.岩石力学与工程学报,2004,23:831—838
- 郭永海,刘淑芬,王驹,等.高放废物处置库选址中的水文地质特性评价.世界核地质科学,2007,24:233—237
- Harbaugh A W, Banta E R, Hill M C, et al. Modflow-2000, the U.S. Geological Survey Modular Ground-Water Model—User Guide to Modularization Concepts and the Ground-Water Flow Process, USGS Open-File Report 00-92. 2000
- D'Agnes F A, Faunt C C, Hill M C, et al. Death valley regional ground-water flow model calibration using optimal parameter estimation methods and geoscientific information systems. Adv Water Resour, 1999, 22: 777—790[doi]
- Zhang K N, Wu Y S, Bodvarsson G S. Parallel computing simulation of fluid flow in the unsaturated zone of Yucca Mountain, Nevada. J Contam Hydrol, 2003, 62: 381—399[doi]
- Wu Y S, Zhang K N, Ding C, et al. An efficient parallel-computing method for modeling nonisothermal multiphase flow and multi-component transport in porous and fractured media. Adv Water Resour, 2002, 25: 243—261[doi]
- OpenMP Architecture Review Board. OpenMP Application Program Interface (Version 2.5). 2005
- Hill M C. Preconditioned Conjugate-Gradient 2 (PCG2), A Computer Program For Solving Ground-Water Flow Equations. USGS Water-Resources Investigations Report 90-4048. 2003
- Quinn M J. Parallel Programming in C with MPI and OpenMP. 北京:清华大学出版社,2005.406
- 刘淑芬,郭永海,王驹,等.高放废物地质处置库北山预选区地下水的形成和分布.铀矿地质,2007,23:356—362
- 郭永海,杨天笑,刘淑芬.高放废物处置库甘肃北山预选区水文地质特征研究.铀矿地质,2001,17:184—189
- 董艳辉,李国敏,郭永海.SRTM3 DEM在区域地下水数值模拟中的应用.工程勘察,2008,11:41—43
- Doherty J. PEST: Model-Independent Parameter Estimation User Manual (5th ed), 2002