

На правах рукописи

Капырин Иван Викторович

**Трехмерное моделирование
процессов переноса примесей в пористых
средах сложной структуры**

Специальность: 05.13.18 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2007

Работа выполнена в Институте вычислительной математики РАН

Научный руководитель: Доктор физико-математических наук,
Ю.В. Василевский

Официальные оппоненты: Доктор физико-математических наук
В.И. Агошков
Кандидат технических наук,
А.В. Расторгуев

Ведущая организация: Институт математического
моделирования РАН

Защита состоится 9 ноября 2007 года в 15 часов на заседании диссертационного совета Д 002.045.01 в Институте вычислительной математики РАН по адресу: 119333, Москва, ул. Губкина, д.8, ауд.727.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института вычислительной математики РАН.

Автореферат разослан ___ октября 2007 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
доктор физико-математических наук

Г.А. Бочаров

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Необходимость в решении задачи переноса примесей в пористых средах возникает при математическом моделировании распространения ядерных или химических загрязнений в геологических пластах. Источниками таких загрязнений служат подземные хранилища радиоактивных отходов, сооружаемые в ряде стран с развитой ядерной энергетикой. Интерес к этим задачам и их актуальность обусловлены необходимостью прогноза миграции загрязнений с целью обеспечения безопасности жизнедеятельности человека.

Цель диссертационной работы. Целью данной диссертационной работы является разработка вычислительных схем и создание программного комплекса для трехмерного численного моделирования задач переноса примесей в пористых средах с реальными параметрами.

Научная новизна. В работе предложено новое семейство методов конечных объемов для численного решения диффузионных задач с полным неоднородным тензором диффузии на неструктурированных тетраэдральных сетках, доказана теорема об их монотонности. Создана технология решения нестационарных задач конвекции-диффузии на динамически перестраиваемых сетках. Проведены следующие исследования: сравнение схем расщепления для нестационарного уравнения конвекции-диффузии с традиционными схемами; тестирование нового переобуславливателя для диффузионных задач и его сравнение с существующими. Решена прикладная трехмерная задача с реальными коэффициентами.

Достоверность результатов. Достоверность результатов диссертационной работы обоснована использованием теории численных методов и строгих математических выводов, результатами вычислительных экспериментов на тестовых примерах.

Используемые методы. В исследовании применяются следующие методы. Построение математических моделей рассматриваемых задач основывается на законах Дарси и сохранения массы. Разработка нового семейства трехмерных методов конечных объемов строится на идее двумерного монотонного метода конечных объемов К.Ле Потье. Для дискретизации задач используются метод конечных элементов, метод конечных объемов, метод смешанных конечных элементов (в гибридной постановке), схемы расщепления оператора.

Решение возникающих линейных систем осуществляется итерационными методами на подпространствах Крылова. Для переобуславливания

систем применяются метод неполной факторизации ILU2 И.Е.Капорина и параллельный метод декомпозиции области Ю.В.Василевского. Вывод и анализ нового переобуславливателя для диффузионных задач основан на теории двухуровневых переобуславливателей Ю.А.Кузнецова.

При распараллеливании алгоритмов используется метод инерциальной бисекции для разделения сетки между процессорами и MPI-библиотека для организации межпроцессорных обменов.

Теоретическая и практическая ценность. Теоретическая ценность работы состоит в разработке нового семейства методов конечных объемов для дискретизации диффузионного оператора. Метод обладает свойством монотонности в смысле неотрицательности получаемого численного решения стационарного или нестационарного уравнения диффузии с соответствующими начально-краевыми условиями и источником.

Практическая ценность заключается в создании программного комплекса на языке Fortran для численного трехмерного моделирования распространения ядерных или химических загрязнений в геологических пластах. Программа имеет параллельную реализацию, что важно при решении больших задач. Решена практическая задача о распространении ядерных загрязнений из подземного хранилища радиоактивных отходов.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы докладывались автором и обсуждались на научных семинарах Института вычислительной математики РАН, Института математического моделирования РАН, в университете г.Линчопинг (Швеция) и на следующих конференциях:

- II-ая международная конференция по матричным методам и операторным уравнениям, Москва, июль 2007г.
- Конференция SIAM по математическим и вычислительным аспектам геологии, США, Санта-Фе, март 2007г.
- XLIX-ая научная конференция МФТИ “Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук”, Москва, декабрь 2006г.
- VII -ой Международный научный симпозиум по итерационным методам IMACS, США, Колледж Стейшн, университет Texas A&M, ноябрь 2006г.
- Всероссийская молодежная школа-конференция “Численные методы решения задач математической физики”, Казань, июнь-июль 2006г.

- Международная конференция “Тихонов и современная математика”, Москва, июнь 2006г.
- Конференция “Ломоносовские чтения”, Москва, апрель 2006г.
- Международный симпозиум по проблемам моделирования захоронений ядерных отходов MOMAS, Франция, Марсель, ноябрь 2005г.
- Конференция “Тихоновские чтения” , Москва, октябрь 2005г.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 5 работ: 2 — в рецензируемых журналах (входят в перечень ВАК), 1 — в сборнике научных трудов, 2 — в материалах конференций. Список работ приведен в конце автореферата.

Личный вклад автора. В совместной работе [2] вклад автора заключался в программной реализации переобуславливателя и постановке численных экспериментов, в работе [5] — в разработке параллельного алгоритма, его программной реализации и проведении расчетов на многопроцессорной ЭВМ.

Структура работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы из 62 наименований, включает 38 рисунков и 21 таблицу. Общий объем диссертации – 115 страниц.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** определена область практического применения разрабатываемых в работе методов, дан обзор работ, связанных с трехмерным численным моделированием переноса примесей в пористых средах, приведены основные результаты диссертации и ее структура.

В **первой главе** дается физическая постановка задачи, вводятся соответствующие математические модели и необходимые характеристики пористых сред. Рассматриваемая задача заключается в нахождении фильтрационных потоков и концентрации примеси в растворе как функций времени и пространственных координат.

Первый параграф этой главы посвящен модели однофазного фильтрационного течения в насыщенной пористой среде. Введены понятия коэффициента пористости ω и тензора проницаемости k . Коэффициент пористости характеризует плотность пор в среде, а тензор проницаемости — зависимость скорости фильтрационного потока от градиента давления.

Модель фильтрации основана на законе Дарси и законе сохранения массы жидкости. Закон Дарси устанавливает зависимость фильтрационных потоков от градиента гидравлического напора:

$$\vec{u} = -K \nabla H = -\frac{k}{\mu} (\nabla p + \rho g \nabla z), \quad (1)$$

где \vec{u} — вектор скорости фильтрационного потока; ρ — плотность жидкости, которая предполагается постоянной в среде; g — гравитационная постоянная; p — давление; $K = \frac{\rho g}{\mu} k$ — коэффициент фильтрации, зависящий от свойств пористой среды и жидкости; z — геометрический напор (высота точки); $H = \frac{p}{\rho g} + z$ — гидравлический напор; μ — динамическая вязкость жидкости. Закон сохранения массы жидкости постулирует, что изменение массы жидкости в элементарном объеме определяется изменением за счет сжимаемости и за счет внешних источников или стоков с массовой интенсивностью f :

$$-\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = \frac{\partial(\omega \rho)}{\partial t} - f. \quad (2)$$

Система (1),(2) дополняется граничными условиями, которые могут быть типа Дирихле, типа Неймана и смешанными.

Во *втором параграфе* описана модель переноса примеси в пористой среде. Последовательно дано описание физических явлений конвекции,

диффузии, дисперсии, адсорбции. Процесс конвекции заключается в распространении примеси вместе с общим фильтрационным потоком. Молекулярная диффузия и кинематическая дисперсия отражают процессы смешивания жидкостей, заполняющих поры. Эффект молекулярной диффузии связан с наличием градиента концентрации примеси в жидкости и не зависит от скорости фильтрационного потока. Кинематическая дисперсия заключается в перемешивании жидкостей вследствие неоднородности поля фильтрационного потока на микроскопическом уровне. Перенос примеси может замедляться под действием эффекта адсорбции: молекулы растворенной в жидкости примеси временно закрепляются (адсорбируются) на поверхности пор. При расчете распространения ядерных загрязнений требуется также учитывать радиоактивный распад. Результирующая модель распространения радиоактивной примеси выражается в законе сохранения массы примеси в виде уравнения конвекции-диффузии в пористой среде:

$$\omega R \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \lambda C \right) = -\nabla \cdot (C\vec{u}) + \nabla \cdot \mathcal{D}\nabla C + \tilde{f}, \quad (3)$$

где R — коэффициент задержки, ω — пористость, C — концентрация примеси в растворе, λ — постоянная радиораспада, \mathcal{D} — тензор диффузии-дисперсии (симметричная положительно определенная матрица 3×3). На границах области возможна постановка граничных условий типа Дирихле, типа Неймана или задание общего потока примеси через границу.

В пренебрежении изменением плотности жидкой фазы, заполняющей поры, задачи фильтрации и переноса решаются независимо друг от друга: сначала находятся фильтрационные потоки, затем они используются для расчета распространения примеси.

Вторая глава диссертации посвящена разработке и исследованию свойств численных методов, используемых при моделировании переноса примесей в пористых средах. В главе предлагается новое семейство нелинейных монотонных методов конечных объемов (МКО) для диффузионных задач, описаны две схемы расщепления для задач конвекции-диффузии, проведено их экспериментальное исследование и сравнение с двумя традиционными схемами.

В *первом параграфе* даны необходимые в дальнейшем определения, связанные с тетраэдральной сеткой и функциональными пространствами.

Во *втором параграфе* дана формулировка нового метода конечных

объемов и описаны его свойства. Рассматривается стационарная задача диффузии с двумя типами граничных условий в смешанной постановке:

$$\nabla \cdot \vec{r} = f, \quad (4)$$

$$\vec{r} = -\mathcal{D}\nabla C \text{ в } \Omega, \quad (5)$$

$$C|_{\Gamma_D} = g^D(x), \quad \vec{r} \cdot \vec{n}|_{\Gamma_N} = g^N(x).$$

Здесь: \vec{r} — диффузионный поток; $\Omega \in \mathbf{R}^3$ — расчетная область с границей $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$.

Построим в области Ω сетку ε_h , содержащую N_T тетраэдров. Для каждого тетраэдра T в сетке ε_h вводится точка X_T — носитель степени свободы на T . Пусть $T = ABCD$ с гранями a, b, c, d , противолежащими A, B, C, D , соответственно; $\vec{R}_A, \vec{R}_B, \vec{R}_C, \vec{R}_D$ — радиус-векторы соответствующих вершин T , а векторы $\vec{n}_a, \vec{n}_b, \vec{n}_c, \vec{n}_d$ — внешние нормали к граням, длины нормалей численно равны площадям соответствующих граней. Для радиус-вектора \vec{R}_{X_T} точки X_T положим:

$$\vec{R}_{X_T} = \frac{\vec{R}_A \|\vec{n}_a\|_{\mathcal{D}} + \vec{R}_B \|\vec{n}_b\|_{\mathcal{D}} + \vec{R}_C \|\vec{n}_c\|_{\mathcal{D}} + \vec{R}_D \|\vec{n}_d\|_{\mathcal{D}}}{\|\vec{n}_a\|_{\mathcal{D}} + \|\vec{n}_b\|_{\mathcal{D}} + \|\vec{n}_c\|_{\mathcal{D}} + \|\vec{n}_d\|_{\mathcal{D}}}, \quad (6)$$

где $\|\vec{n}_\beta\|_{\mathcal{D}} = \sqrt{(\mathcal{D}\vec{n}_\beta, \vec{n}_\beta)}$, $\beta \in \{a, b, c, d\}$.

Интегрируя по каждому $T \in \varepsilon_h$ закон сохранения массы (4) с использованием формулы Гаусса-Остроградского и переходя к дискретной формулировке, получаем:

$$\sum_{e \in \partial T} \vec{r}_e \cdot \vec{n}_e = \int_T f \, dx \quad \forall T \in \varepsilon_h, \quad (7)$$

где \vec{n}_e — внешняя нормаль к грани e тетраэдра T , длина которой численно равна площади соответствующей грани, т.е. $|\vec{n}_e| = |e|$, а $\vec{r}_e \cdot \vec{n}_e$ — аппроксимация диффузионного потока через грань e . Главной идеей метода является способ построения аппроксимации диффузионного потока $\vec{r}_e \cdot \vec{n}_e$. Для этого рассматриваются два соседних тетраэдра $T_+ = AO_1O_2O_3$ и $T_- = BO_1O_2O_3$ (см. рис.1). Точки X_+, X_- — соответствующие T_+ и T_- точки-носители, M — центр масс общей грани e , $e = O_1O_2O_3$. С помощью интегрирования (5) по тетраэдрам вида $X_+MO_jO_k$, $X_-MO_jO_k$ строятся аппроксимации диффузионных потоков $\vec{r}_i \cdot \vec{n}_e/3$, $i \in \{1, 2, 3\}$, через каждый из треугольников MO_jO_k (i, j, k — различны). Общий поток через грань представляется линейной комбинацией этих трех потоков:

$$\vec{r}_e \cdot \vec{n}_e = \mu_1^e \vec{r}_1 \cdot \vec{n}_e + \mu_2^e \vec{r}_2 \cdot \vec{n}_e + \mu_3^e \vec{r}_3 \cdot \vec{n}_e. \quad (8)$$

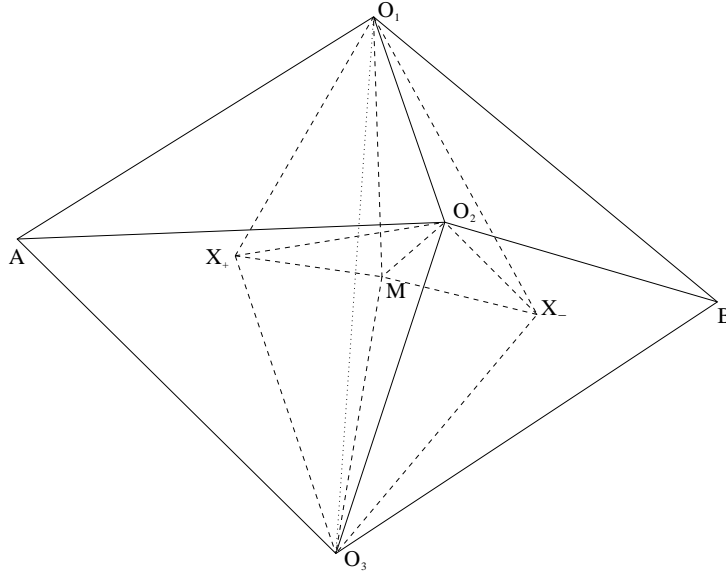


Рис. 1: Геометрические построения для нелинейного метода конечных объемов.

Он зависит от значений концентрации C_{X_+} , C_{X_-} в точках-носителях X_+, X_- и C_{O_i} в точках O_i , $i \in \{1, 2, 3\}$. Значения C_{O_i} с помощью линейной интерполяции выражаются через концентрацию в точках-носителях X_T .

Для определения коэффициентов μ_i^e , $i = 1, 2, 3$, накладываются ограничения на диффузионный поток через грань e (8) :

- Если величины $\vec{r}_i \cdot \vec{n}_e / |\vec{n}_e|$ аппроксимируют плотность диффузионного потока, то $\vec{r}_e \cdot \vec{n}_e / |\vec{n}_e|$ также является ее аппроксимацией:

$$\sum_{j=1}^3 \mu_j^e = 1; \quad (9)$$

- Шаблон аппроксимации потока является двухточечным.

Требования двухточечной аппроксимации потока определяют семейство решений $\mu_i^e(p^e)$, $i \in \{1, 2, 3\}$, с параметром p^e .

Отдельно рассматривается случай, когда грань e лежит на границе области. Формулировка метода завершается подстановкой выражений для потоков в закон сохранения массы (7). Нелинейная система уравнений, возникающая при дискретизации (7), имеет вид:

$$A(C_X)C_X = F, \quad (10)$$

где C_X — вектор неизвестных концентраций в точках-носителях X_T , размера N_T . Матрица $A(C_X)$ — разреженная, имеющая не более 5 ненулевых элементов в каждой строке.

Система (10) решается с помощью итерационного алгоритма Пикара

$$A(C_X^k)C_X^{k+1} = F \quad (11)$$

с некоторым начальным приближением C_X^0 .

Важнейшее свойство предложенного метода сформулировано в следующей теореме, доказанной в диссертации:

Теорема. *Положим в задаче (4) правую часть $f(x) \geq 0$ в Ω , граничные условия $g^D(x) \geq 0$ на Γ_D , $g^N(x) \leq 0$ на Γ_N . Пусть (10) — соответствующая задаче (4) нелинейная система МКО, для которой точки-носители степеней свободы на тетраэдрах определяются формулой (6), начальное приближение $(C_X^0)_i \geq 0$, и на каждой итерации метода Пикара (11) для любой внутренней грани e выбираются неотрицательные значения μ_i^e , $i \in \{1, 2, 3\}$ (последнее всегда возможно). Тогда все итерационные приближения к C_X неотрицательны,*

$$(C_X^k)_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, N_T, \quad \forall k \geq 0.$$

Доказательство теоремы основано на том факте, что в условиях теоремы матрица $A(C_X^k)$ монотонна, а правая часть F неотрицательна.

В конце параграфа приведены примеры построения на основе нового МКО схем для нестационарного уравнения диффузии. Схемы сохраняют неотрицательность решения.

В *третьем параграфе* главы рассматриваются две схемы расщепления для аппроксимации нестационарного уравнения конвекции-диффузии: схема Ж.ЖафFRE, использующая разрывные конечные элементы (РКЭ) для оператора конвекции и метод смешанных конечных элементов (МСКЭ) для оператора диффузии, и новая схема расщепления с монотонной МКО-аппроксимацией оператора диффузии и РКЭ для оператора конвекции.

В схеме ЖафFRE аппроксимация по времени построена следующим образом: используется явная схема предиктор-корректор для конвективного оператора и схема Кранка-Николсон — для диффузионного. Для стабилизации схемы в корректоре применяется противопотоковая аппроксимация конвективного члена. Использование РКЭ требует на каждом шаге по времени модифицировать решение с помощью ограничителя

наклона. Важной особенностью схемы является то, что расщепление на физические процессы в ней является лишь следствием разложения пространства линейных базисных тестовых функций на ортогональные подпространства, и на каждом шаге схемы аппроксимируется полное уравнение, в отличие от традиционных схем расщепления. В силу этого, в метод не вносится дополнительная аппроксимационная ошибка, что позволяет рассматривать его формально как метод второго порядка по времени и по пространству. Противопотоковая аппроксимация конвективного члена также не снижает порядка аппроксимации благодаря использованию разрывных конечных элементов.

Во второй схеме реализовано расщепление по физическим компонентам, операторы диффузии и конвекции разнесены по подшкагам, и на каждом подшаге решается неполное уравнение. Для аппроксимации конвективного члена снова применяется метод РКЭ и явная схема предиктор-корректор, для диффузионного члена — новый монотонный МКО (или МСКЭ) и неявная схема. Важным достоинством данной схемы по отношению к схеме Жаффре является возможность использования разных шагов по времени для процессов конвекции и диффузии. Шаг по времени для конвективных процессов определяется требованиями устойчивости схемы, в то время как для диффузионных процессов — только требованиями точности. При равных шагах для конвекции и диффузии (как в схеме Ж.Жаффре) реализация диффузионного подшага занимает около 80% времени, и увеличение шага для диффузии дает существенную экономию времени счета.

В *четвертом и пятом параграфах* проводится сравнение вышеописанных схем расщепления с двумя неявными аппроксимациями уравнения конвекции-диффузии: неявной трехслойной схемой второго порядка по времени (BDF) для МКЭ первого порядка с SUPG стабилизацией и BDF-схемой МСКЭ с противопотоковой аппроксимацией конвективного члена. *Четвертый параграф* посвящен тестированию на задачах с гладким решением, а *пятый* — на задаче о переносе фронта концентрации. Схемы расщепления показывают порядок аппроксимации концентрации, близкий ко второму, и первый порядок аппроксимации потоков. Использование разрывных конечных элементов делает их наиболее приспособленными к задачам переноса фронта концентрации, в которых они показывают низкую численную диффузию. Схема Жаффре в применении к задаче с негладким решением демонстрирует очень малые нарушения монотонности. Новая схема с нелинейным МКО дает результаты, близ-

кие к результатам расчета схемой ЖафFRE, но гарантирует неотрицательность решения, что очень важно для практических задач.

Третья глава посвящена методам повышения эффективности вычислений. В *первом параграфе* описан алгоритм распараллеливания расчетов применительно к схеме ЖафFRE. Основные этапы параллелизации следующие: разбиение области по процессорам с помощью метода инерциальной бисекции; параллелизация локальных шагов; параллелизация итерационного метода решения СЛАУ. Для переобуславливания линейных систем используется метод декомпозиции области Ю.В.Василевского. Проведены численные эксперименты на 4, 8, 16 процессорах, показывающие эффективность распараллеливания (время счета на 16 процессорах в 2.5-3 раза меньше, чем на 4 процессорах).

Во *втором параграфе* представлен алгоритм решения задач конвекции-диффузии на динамически перестраиваемых сетках. Перестроение сетки осуществляется с помощью метода отмеченного ребра, позволяющего автоматически измельчать и разгружать расчетную сетку в требуемых подобластях. Предложены новые алгоритмы переинтерполяции решения с одной сетки на другую при измельчении или загрузлении сетки. Они сохраняют не только массу вещества, но и диффузионные потоки через грани сетки. Метод протестирован на двух задачах: переносе фронта от границы области и вращении непрерывного “всплеска” по кругу. Показано, что применение динамических сеток позволяет существенно (в 4 раза для первой задачи, на 30% для второй) сократить время счета и понизить численную диффузию по сравнению с решением на статической сетке.

В *третьем параграфе* исследуется переобуславливатель для диффузионных задач с неоднородным анизотропным тензором диффузии, разработанный Ю.А.Кузнецовым в сотрудничестве с автором диссертации. Переобуславливатель сформулирован для случая пластовых сред и матрицы дискретизации простейшего МКО на сетке Вороного. Проведенные численные эксперименты подтверждают теоретический результат Ю.А. Кузнецова о независимости числа обусловленности переобусловленной матрицы МКО-аппроксимации от коэффициентов диффузии и шага сетки по вертикальной оси. Сравнение переобуславливателя с двумя другими (алгебраическим многосеточным методом Штюбена и блочным методом Якоби) показывает его эффективность.

В **четвертой главе** приведены результаты численного моделирования тестового задания Andra 3D, предложенного французским агент-

ством по ядерным отходам (www.andra.fr). Данные задачи соответствуют измерениям в зоне реального захоронения ядерных отходов.

В *первом параграфе* главы дано описание геометрии и пластовой структуры расчетной области, определены физические параметры, необходимые для моделирования фильтрации и переноса, а также граничные условия задачи. Задача обладает рядом трудностей: анизотропия (2 порядка) и неоднородность (до 10 порядков) тензора фильтрации; сильная анизотропия области (диаметр области — 55км, глубина — 600м); неоднородность и анизотропия полного тензора диффузии; выклинивания геологических пластов; необходимость прогноза на большой период времени (сотни тысяч лет).

Второй параграф посвящен проблеме выбора расчетной сетки. Рассмотрено три подхода к построению расчетных сеток. Первый подход заключается в построении полностью неструктурированной, сгущающейся к источнику загрязнения сетки с помощью библиотеки `api3D`, разработанной Ю.В. Василевским, К.Н. Липниковым и др. Второй подход позволяет строить тетраэдральные сетки путем разбиения вертикальных треугольных призм. Основания призм являются элементами двумерной треугольной сетки в проекции расчетной области на плоскость XU . Третий подход, разработанный автором в сотрудничестве с Ю.В. Василевским и В.Н. Чугуновым, заключается в построении гексаэдральной сетки, разбиении ее элементов на тетраэдры и локальном измельчении в области источника загрязнений. Недостатком первых двух подходов является наличие в сетке тупых двугранных углов, что приводит к крайне плохой обусловленности матриц аппроксимации. К тому же, первый подход имеет существенные ограничения на число тетраэдров в сетке. Для расчетов с помощью третьего подхода была построена сетка, содержащая 2.5 млн тетраэдров (около 5 млн неизвестных в возникающих линейных системах).

В *третьем параграфе* обоснован выбор схем для расчета задач фильтрации и переноса. Для расчета фильтрационных потоков применяется схема гибридного МСКЭ. При моделировании распространения загрязнения используется схема расщепления по физическим компонентам (из гл.2) с разными шагами по времени для конвективного и диффузионного процессов. Для аппроксимации конвективного переноса в ней используются РКЭ, для диффузионного — МСКЭ.

В *четвертом параграфе* представлены результаты расчета гидравлического напора и фильтрационных потоков. Особенностью задачи яв-

ляется то, что скорость фильтрационных потоков в верхних, непокрытых, пластах значительно (на 4-5 порядков) выше, чем в нижних. Это утверждение справедливо и для диффузионных потоков, так как тензор дисперсии линейно зависит от скорости фильтрации. Расчетная область условно разделяется на подобласти Ω_F , состоящую из верхних пластов, и Ω_S , включающую все остальные пласты. Разделение на подобласти используется при моделировании переноса загрязнений.

В *пятом параграфе* приведены результаты моделирования распространения ядерных загрязнений (Йод 129) на период в 350000 лет. Расчет переноса осложнялся сжатием сетки по вертикали, анизотропией и неоднородностью тензора диффузии, разными временными масштабами процессов в верхних и нижних геологических пластах. Задача решается в рамках двух моделей: модели медленного распространения в подобласти Ω_S и модели быстрого распространения в подобласти Ω_F . Показана динамика распространения изоповерхности концентрации $C = 10^{-14} \text{ кг/м}^3$ вплоть до 350000 лет. В результате расчетов получен прогноз времени и места выхода на земную поверхность загрязненных вод с концентрациями радиоактивного Йода 129, равными 10^{-14} , 10^{-12} , 10^{-10} кг/м^3 . Вычисления проводились на параллельной многопроцессорной ЭВМ с использованием 12 процессоров в течение 29 часов. Полученные данные о распределении времени счета по шагам расчетной схемы оправдывают использование разных шагов по времени для моделирования конвективного и диффузионного процессов.

В **заключении** кратко сформулированы результаты диссертационной работы и сделаны выводы о ее теоретической и практической ценности.

Основные результаты диссертационной работы:

1. Разработано новое семейство монотонных методов конечных объемов для аппроксимации диффузионных задач с полным и неоднородным тензором диффузии на неструктурированных тетраэдральных сетках.
2. Создан программный комплекс для решения трехмерных задач переноса примесей в пористых средах, включающий алгоритмы построения тетраэдральной сетки, расчета фильтрационных потоков и расчета переноса примеси (два последних алгоритма параллелизованы).

3. Предложены и протестированы новые алгоритмы повышения эффективности вычислений: решение задач переноса на динамически перестраиваемых расчетных сетках; двухуровневый переобуславливатель для диффузионных задач со скачками анизотропного тензора диффузии.
4. Проведено численное моделирование трехмерной задачи с реальными параметрами.

Публикации по теме диссертации:

1. Капырин И. В. Семейство монотонных методов численного решения трехмерных задач диффузии на неструктурированных тетраэдральных сетках // Доклады Академии Наук. 2007. Т.614, №5, С.588-593.
2. Kuznetsov Yu. A., Voiarkine O. V., Kapyrin I.V., Yavich N.B. Numerical analysis of a two-level preconditioner for the diffusion equation with an anisotropic diffusion tensor // Russian J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2007. Vol.22, №4, P. 377-391.
3. Капырин И. В. Об использовании динамических сеток при решении задач конвекции-диффузии // Труды математического центра им. Н.И. Лобачевского. 2006. Т.31, С.166-175.
4. Капырин И. В. Численное решение задач переноса загрязнений в подземных водоносных слоях на тетраэдральных сетках с использованием многопроцессорных ЭВМ // Book of abstracts of international conference "Tikhonov and contemporary mathematics", section 2: Mathematical modelling. М.: Изд-во МГУ. 2006. С.91-92.
5. Василевский Ю. В., Капырин И. В. Параллельное трехмерное моделирование распространения примесей в пористых средах // Матричные методы и технологии решения больших задач. М.: ИВМ РАН. 2005. С.33-50.