



Математическое моделирование почвенных процессов с использованием открытого программного обеспечения

*К.Б. Кошелев, ORCID: 0000-0002-7124-3945 <k.koshelev@ispras.ru>
А.В. Кулинский, ORCID: 0009-0004-6407-054X <a.kulinsky@ispras.ru>
С.В. Стрижак, ORCID: 0000-0001-5525-5180 <s.strihjak@ispras.ru>*

*Институт системного программирования им. В.П. Иванникова РАН,
Россия, 109004, г. Москва, ул. А. Солженицына, д. 25.*

Аннотация. В настоящее время задача построения цифровых двойников различных природных и технических объектов является актуальной задачей. В работе рассматриваются возможности открытого ПО для разработки цифровых двойников почвенных процессов. Облачная платформа для проведения научных исследований может быть спроектирована и создана на базе аппаратно-программного комплекса, куда входят такие компоненты как сервера, система хранения данных, сетевое оборудование, стек системного программного обеспечения, виртуальные машины, микросервисы и другие элементы. Облачная платформа может быть выступать основной для проектов разработки цифровых двойников. В качестве исходных данных для построения цифрового двойника почвенных полей могут выступать метеорологические данные, данные по цифровому рельефу местности, данные по физико-химическому составу почвы, данные по сельскохозяйственным культурам, синтетические данные. В статье рассматриваются возможности открытых программных комплексов ParFlow, OpenFOAM, Paraview для моделирования почвенных процессов с использованием уравнения Ричардса для однофазной среды. Физическое моделирование проведено для случаев задания модельных почвенных полей с заданной проницаемостью и пористостью среды. В результате расчета получены поля влагонасыщенности, гидростатического напора, скорости движения влаги. В одной из модельных задач также исследовалось влияние наличия скважины на поле давления. Базовая расчетная сетка включала в себя 288 000 расчетных ячеек. Типовые расчеты проведены на вычислительном кластере ИСП РАН. Один типовый расчет запускался на 12 ядер и выполнялся по времени около 20 минут. Визуализация результатов расчета выполнена в пакете Paraview с использованием технологии фильтров и программных скриптов на языке программирования Python.

Ключевые слова: цифровой двойник; почвенное поле; моделирование; сетка; поле; скорость; давление; влагонасыщенность; визуализация; вычислительный кластер.

Для цитирования: Кошелев К.Б., Кулинский А.В., Стрижак С.В. Математическое моделирование почвенных процессов с использованием открытого программного обеспечения. Труды ИСП РАН, том 37, вып.1, 2025 г., стр. 201–216. DOI: 10.15514/ISPRAS–2025–37(1)–12.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2024-545 от 24 апреля 2024 года).

Mathematical Modeling of Soil Processes using Open-Source Software

K.B. Koshelev, ORCID: 0000-0002-7124-3945 <k.koshelev@ispras.ru>

A.V. Kulinsky, ORCID: 0009-0004-6407-054X <a.kulinsky@ispras.ru>

S.V. Strijhak, ORCID: 0000-0001-5525-5180 <s.strijhak@ispras.ru>

*Ivannikov Institute for System Programming of the Russian Academy of Sciences,
25, Alexander Solzhenitsyn st., Moscow, 109004, Russia.*

Abstract. Nowadays the task of building digital twins of various natural and technical objects is an urgent task. The paper considers the possibilities of open source software for the development of digital twins of soil processes. Cloud platform for scientific research can be designed and created on the basis of hardware and software complex, which includes such components as servers, data storage system, network equipment, system software stack, virtual machines, microservices and other elements. The cloud platform can act as the main platform for digital twin development projects. Meteorological data, data on digital terrain relief, data on physical and chemical composition of soil, data on agricultural crops, synthetic data can be used as input data for building a digital twin of soil fields. In the article the possibilities of open-source software packages ParFlow, OpenFOAM, Paraview for modeling of soil processes using Richards equation for single-phase medium are considered. Physical modeling was carried out for cases of model soil fields with given permeability and porosity of the medium. As a result of the calculation, the fields of moisture saturation, hydrostatic head, and moisture velocity were obtained. In one of the modeling problems the influence of well presence on the pressure field was also investigated. The basic calculation grid included 288,000 calculation cells. Typical calculations were performed on the high-performance cluster of ISP RAS. One typical calculation was run on 12 cores and took about 20 minutes. Visualization of the calculation results was performed in the Paraview package using filter technology and software scripts in the Python programming language.

Keywords: Digital twin; soil field; modeling; grid; field; velocity; pressure; moisture saturation; visualization; computational cluster.

For citation: Koshelev K.B., Kulinsky A.V., Strijhak S.V. Mathematical modeling of soil processes using open-source software. *Trudy ISP RAN/Proc. ISP RAS*, vol. 37, issue 1, 2025, pp. 201-216 (in Russian). DOI: 10.15514/ISPRAS-2025-37(1)-12.

Acknowledgements. The work was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Agreement No. 075-15-2024-545 dated April 24, 2024).

1. Введение

Россия является лидером в мире по площади земель сельхозназначения, находится в первой пятерке стран по площади пашни и запасам природных ресурсов, обладает необходимыми природными условиями для обеспечения продовольственной безопасности страны.

В стратегии развития РФ сформулирована принципиальная задача перевода экономики на качественно новые принципы работы с точки зрения управления на основе больших данных как о системообразующей инфраструктуре для дальнейшего развития страны с использованием цифровых платформ в различных отраслях и, в частности, цифровых двойников технических систем и процессов, применения точного земледелия в сельском хозяйстве.

Цифровые двойники — одно из самых развивающихся направлений в области компьютерных наук, основанное на конвергенции передовых информационных технологий, включая киберфизические системы, компьютерное моделирование, Интернет вещей, большие данные, искусственный интеллект, виртуализацию вычислительных ресурсов и ряд других.

Можно выделить три направления, на решение которых направлено создание виртуальных образов, в которых хранится вся информация о состояниях физической системы — цифровых двойников почв:

- 1) управление процессами в растениеводстве – основа адаптивно-ландшафтной системы земледелия нового технологического уклада;
- 2) реализации сценарных прогнозов трансформации почвенного покрова в результате хозяйственной деятельности и улучшения качества почвы в контексте модельного предикативного управления;
- 3) оценка экономической эффективности возделывания с/х культур с учетом набора агротехнологий и изменения почвенно-климатических ресурсов.

В настоящее время современные подходы к реализации цифровых двойников почв и агроландшафтов лишены концептуальной основы, что затрудняет применения и понимания актуальности использования цифровых двойников в растениеводстве, что определяет актуальность данной работы.

Использование цифровых двойников в сельском хозяйстве еще не вышло на практический уровень. С одной стороны, сельскохозяйственные процессы обычно более сложны, чем промышленные процессы. Эта сложность связана не только с высокой размерностью данных, но и с тем фактом, что многие переменные, обуславливающие поведение процессов, носят стохастический характер и не поддаются управлению или контролю. Кроме того, большая площадь, на которой происходят сельскохозяйственные процессы, в сочетании с неоднородными условиями, характерными для этих территорий, требует пространственного и временного разрешения данных, что сложно технически и экономически.

В целом, концепция адаптивно-ландшафтного земледелия тесно связана с парадигмами управления растениеводством, где к стандартным производственным процессам добавляется слой информационных технологий. Пространственная и временная информация, полученная из множества различных источников, может быть интегрирована в алгоритмы машинного обучения и в нейронные сети для достижения контроля над всеми операционными аспектами производственной деятельности [1-3].

2. Концепция цифровых двойников

В настоящее время в ИСП РАН ведется разработка облачной платформы на базе аппаратных и собственных программных решений (Asperitas, Michman, Talisman, FanLight) для создания цифровых двойников почвенных полей в рамках Крупного Научного Проекта с Министерством Науки и Высшего Образования РФ. На рис. 1 представлена общая схема работы пользователя с данными, с математическими моделями и программными библиотеками в рамках созданных виртуальных машин, с тематической базой данных, с системой научной визуализации результатов расчета, с системой формирования набора данных и моделей машинного обучения моделей.

В качестве исходных данных для создания цифрового двойника почвенного поля могут выступать метеорологические данные с метеостанций и моделей регионального климата, данные по цифровому рельефу местности, данные по физико-химическому и биологическому составу почвы, данные по сельскохозяйственным культурам, синтетические данные и другие (рис. 2). На первом этапе в качестве математических моделей могут быть рассмотрены базовые модели в составе открытых программных кодов и библиотек (OpenFOAM, ParFlow, APSIMX, Delft3D, WRF-Hydro), библиотек для научной визуализации почвенных процессов и структур (Paraview, VisIt, Fiji), модели для физически-информированных нейронных сетей (DeepXDE, Nvidia Modulus, PyTorch, TensorFlow, Keras).

В основе концепции цифровых двойников заложена идея использования нейронных сетей для проведения расчетов в режиме реального времени.

Полученные синтетические данные могут быть использованы для разработки и обучения физически-информированных нейронных сетей для аппроксимации уравнения Ричардса для однофазной и многофазной среды в дальнейшей работе (рис. 2).



Рис.1. Общая схема работы с виртуальными вычислительными ресурсами.
Fig.1 General scheme of work with virtual computing resources.

Физически-информированная нейронная сеть (Physics-Informed Neural Network – PINN) состоит из трех основных блоков. Первая часть включает в себя модуль для вычисления остаточных слагаемых для дифференциальных уравнений в частных производных или относительную погрешность решения в норме L_2 , а также погрешности для начальных и граничных условий. Параметры для полносвязанной нейронной сети определяются путем нахождения минимума для общей функции потерь. Входы для нейронной сети преобразуются в соответствующие выходы. Вторая часть это полносвязанная нейронная сеть с физическими данными, которая берет выходные поля скоростей и вычисляет их производные, используя исходные уравнения, например, для уравнений неразрывности и количества движения при решении задач механики жидкости. Также оцениваются граничные и начальные условия, данные наблюдений из эксперимента. Последним шагом является механизм формирования обратной связи, который минимизирует функцию потерь, используя заданный оптимизатор (Adam, L-BFGS-B), в соответствии с некоторой скоростью обучения, чтобы получить оптимальные параметры для нейронной сети.

3. Математические модели

При изучение почвенных процессов различают три характерных масштаба. Это уровень микропорового пространства, уровень почвенного профиля, уровень агроландшафта. Для генерации синтетических данных с целью разработки PNN могут быть использованы численные методы решения уравнений для гидрологии с переносом веществ на трех масштабных уровнях с применением адаптивной пространственно-временной расчетной сетки:

- 1) микроуровень – пористая среда (на основе томографической структуры почвы и текстуры поверхности), моделирование многофазного потока (обобщенный закон Дарси) в пористой среде с капиллярными явлениями;
- 2) уровень почвенного профиля – моделирование потока и диффузии воды в почве решением уравнения Ричардса;
- 3) ландшафтный уровень (на основе цифровой модели рельефа и карт свойств) – решение уравнений по теории мелкой воды с впитыванием с поверхности [10-12].

В данной работе рассматриваются возможности двух открытых программных комплексов (ParFlow, OpenFOAM) для изучения уровня почвенного профиля, уровня микропорового пространства. Оба программных комплекса доступны в виде исходных файлов, которые можно скачать из Интернета и откомпилировать с нужными библиотеками [4-7].

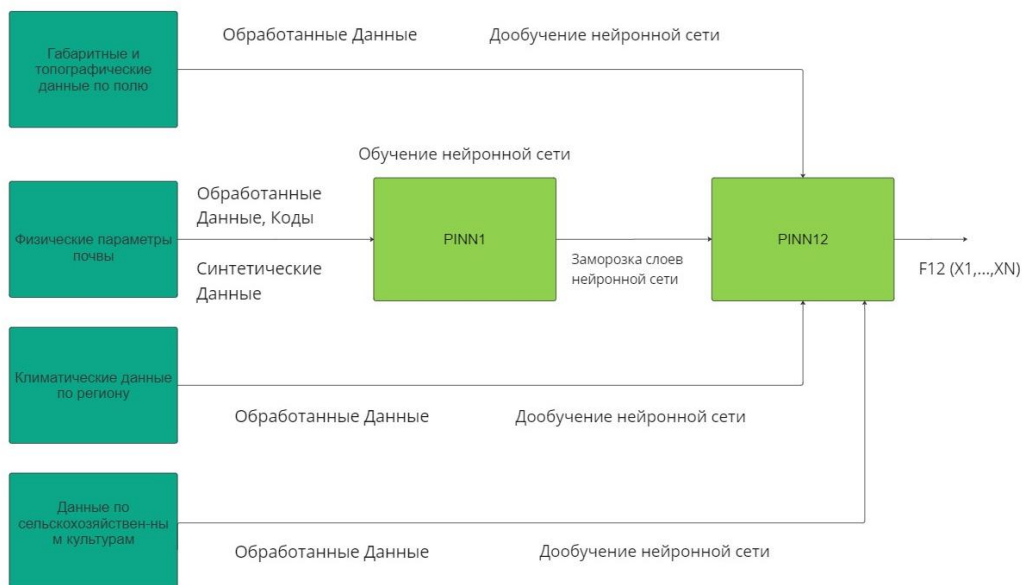


Рис. 2. Общая схема работы с данными и PINN.
Fig. 2. General scheme of work with data and PINN.

3.1 Программный комплекс ParFlow

ParFlow – открытый программный комплекс, предназначенный для моделирования гидрологических процессов с учетом взаимного влияния поверхностных и подземных вод. Данный программный пакет позволяет эффективно учитывать сложные трехмерные пространственные структуры – топографию, различные геологические и гидрологические характеристики, границы водоразделов. Важной особенностью пакета ParFlow является возможность параллельных вычислений с использованием стандарта MPI. Все это позволяет проводить моделирование конечно-разностным методом на участках с значительными пространственными масштабами. В пакете ParFlow поддерживается работа с форматами вывода данных SILO, NETCDF, VTK. Программная реализация ParFlow выполнена на языках программирования Си и Fortran [4-5]. Пакет ParFlow позволяет использовать несколько решателей – стационарное движение грунтовых вод, влагоперенос в ненасыщенной зоне, совместное движение подземных и поверхностных вод с учетом влияния климата, растительности и других факторов.

3.1.1 Модель стационарного движения грунтовых вод

Для нахождения стационарного, полностью насыщенного потока грунтовых вод используется уравнение [9-10]:

$$-\nabla(K\nabla H) = Q, \quad (1)$$

где K – тензор гидравлической проводимости, H – гидростатический напор, Q – пространственно-распределенный источник/сток (например, для учета влияния скважин).

3.1.2 Модель влагопереноса в ненасыщенной зоне

Уравнение Ричардса, описывающее влагоперенос в ненасыщенной зоне, используется в форме [10-11]:

$$S(p)S_s \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial(S(p)\rho(p)\phi)}{\partial t} - \nabla \cdot (K(p)\rho(p)(\nabla p - \rho(p)\vec{g})) = Q \quad (2)$$

где p – напор (пьезометрическая высота), $S(p)$ – функция водонасыщения от напора, S_s – коэффициент упругой ёмкости пласта, t – время, ϕ – пористость среды, $K(p)$ – тензор гидравлической проводимости, Q – источник/сток.

Граничные условия могут быть записаны как:

$$p = p_D \quad (3)$$

или

$$K(p)\nabla p \cdot \mathbf{n} = g_N \quad (4)$$

где p_D – заданный напор, $\mathbf{n}$ – нормаль к границе, g_N – заданный поток.

Начальные условия представляются в виде

$$p = p^0 \quad (5)$$

Тензор гидравлической проводимости рассчитывается по формуле:

$$K(p) = \frac{\bar{k}k_r(p)}{\mu} \quad (6)$$

Здесь $\bar{k}$ – тензор абсолютной проницаемости, $k_r(p)$ – относительная проницаемость, обычно вычисляемая по формуле Ван Генухтена, μ – вязкость воды.

3.1.3 Модель движения поверхностных вод

ParFlow позволяет моделировать совместное движение поверхностных и грунтовых вод. Для движения поверхностных вод используется уравнение кинематической волны:

$$\frac{\partial \psi_S}{\partial t} = \nabla \cdot (\vec{v}\psi_S) + q_r(x) + q_e(x) \quad (7)$$

Здесь ψ_S – глубина, $\vec{v}$ – осредненная по глубине скорость, $q_r(x)$ – боковая приточность/сток, $q_e(x)$ – поток, реализующий взаимодействие с грунтовыми водами.

Формула Маннинга используется для реализации уравнений движения:

$$v_x = -\frac{\sqrt{S_{f,x}}}{n}\psi_S^{2/3}, v_y = -\frac{\sqrt{S_{f,y}}}{n}\psi_S^{2/3} \quad (8)$$

Здесь S_f – гидравлический уклон, в данной модели принимаемый равным наклону уровня поверхности земли, n – коэффициент шероховатости.

На границе вода-дно задается условия непрерывности давления в виде:

$$p = \psi_S = \psi \quad (9)$$

Окончательно, уравнение (7) можно записать как:

$$-K(\psi)\nabla\psi \cdot \mathbf{n} = \frac{\partial \|\psi, 0\|}{\partial t} - \nabla \cdot (\vec{v}\|\psi, 0\|) - q_r(x) \quad (10)$$

где $\|\psi, 0\|$ – оператор максимума величин ψ и 0.

Уравнения движения для уравнения (10) используются в виде:

$$v_x = -\frac{S_{fx}}{n\sqrt{S_f}}\psi^{2/3}, v_y = -\frac{S_{fy}}{n\sqrt{S_f}}\psi^{2/3} \quad (11)$$

где $\bar{S}_f$ – абсолютное значение гидравлического уклона.

3.1.4 Модель многофазных потоков

Модель многофазного течения основана на законе Дарси. Количество фаз ν может быть от 1 до 3 (вода, нефть, газ). Номер фазы i принимает значения от 0 до $\nu - 1$.

Система уравнений движения многофазных сред принимается в виде:

$$\vec{V}_i + \lambda_i \cdot (\nabla p_i - \rho_i \vec{g}) = 0 \quad (12)$$

$$\lambda_i = \frac{\bar{k} k_{ri}}{\mu_i} \quad (13)$$

Здесь $\vec{V}_i$ – вектор скорости Дарси, p_i – давление, ρ_i – плотность, $\bar{k}$ – абсолютная проницаемость, k_{ri} – относительная проницаемость, μ_i – вязкость.

Уравнения неразрывности для $i = 1.. \nu - 1$:

$$\frac{\partial(\phi S_i)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_T} \vec{V}_T + \sum_{j \neq i} \frac{\lambda_i \lambda_j}{\lambda_T} (\rho_i - \rho_j) \vec{g} \right) + \sum_{j \neq i} \nabla \cdot \frac{\lambda_i \lambda_j}{\lambda_T} \nabla p_{ji} - Q_i = 0 \quad (14)$$

Здесь ϕ – пористость, Q_i – источник/сток.

Для $i = 0$:

$$\sum_i S_i = 1 \quad (15)$$

Величины $\vec{V}_T$ и λ_T определяются как:

$$\vec{V}_T = \sum_i \vec{V}_i \quad (16)$$

$$\lambda_T = \sum_i \lambda_i \quad (17)$$

Капиллярное давление между фазой i и фазой j вычисляется по формуле:

$$p_{ji} = p_{j0} - p_{i0} \quad (18)$$

Уравнение для p_0 используется в виде:

$$-\sum_i \{ \nabla \cdot \lambda_i (\nabla(p_0 + p_{i0}) - \rho_i \vec{g}) + Q_i \} = 0 \quad (19)$$

$$p_i = p_0 + p_{i0}, i = 1.. \nu - 1 \quad (20)$$

Замыкающие соотношения:

$$p_{i0} = p_{i0}(S_0), i = 1.. \nu - 1 \quad (21)$$

3.1.5 Модель переноса загрязнителей

Транспорт загрязнителей в многофазной среде определяется следующим уравнением:

$$(\phi + (1 - \phi) \rho_s K_{d;j}) \frac{\partial c_{ij}}{\partial t} + \nabla \cdot (c_{ij} \vec{V}_i) = -(\phi + (1 - \phi) \rho_s K_{d;j}) \lambda_i c_{ij} + \sum_k^{n_I} \gamma_k^{I;i} \chi \Omega_k^I (c_{ij} - \bar{c}_{ij}^k) + \sum_k^{n_E} \gamma_k^{E;i} \chi \Omega_k^E c_{ij} \quad (22)$$

Здесь c_{ij} – концентрация j -го компонента в i -ой фазе, ρ_s – плотность твердой среды, $K_{d;j}$ – коэффициент модели мгновенной адсорбции, n_I – количество нагнетательных скважин, $\gamma_k^{I;i}$ – скорость подачи, Ω_k^I – область нагнетательных скважин, n_E – количество добывающих скважин, $\gamma_k^{E;i}$ – скорость извлечения, Ω_k^E – область добывающих скважин.

Оператор χ определяется формулой

$$\chi A(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } x \in A \\ 0, & \text{если } x \notin A \end{cases} \quad (23)$$

где A – область скважины, x – точка пространства.

3.1.6 Модель водного баланса

ParFlow может вычислять водный баланс для потоков подземных и поверхностных вод с учетом модели поверхности земли *slm*. Уравнение водного баланса записывается в форме:

$$\frac{\Delta(Vol_{subsurface} + Vol_{surface})}{\Delta t} = Q_{overland} + Q_{evapotranspiration} + Q_{sourcesink} \tag{24}$$

Объем подземных вод рассчитывается по формуле:

$$Vol_{subsurface} = \sum_{\Omega} (S(\psi) S_s \psi \Delta x \Delta y \Delta z + S(\psi) \phi \Delta x \Delta y \Delta z) \tag{25}$$

Объем поверхностных вод рассчитывается по формуле:

$$Vol_{surface} = \sum_{\Gamma} \psi \Delta x \Delta y \tag{26}$$

Поток поверхностных вод $Q_{overland}$ рассчитывается в результате решения уравнения кинематической волны. Поток вследствие эвапотранспирации $Q_{evapotranspiration}$ рассчитывается в модели поверхности земли *slm*. Другие источники, стоки $Q_{sourcesink}$ задаются пользователем.

3.2 Библиотека porousmultiphaseFoam

Библиотека porousmultiphaseFoam реализована в программном комплексе OpenFOAM-v2306. Структура библиотеки porousmultiphaseFoam, представлена на рис. 3.

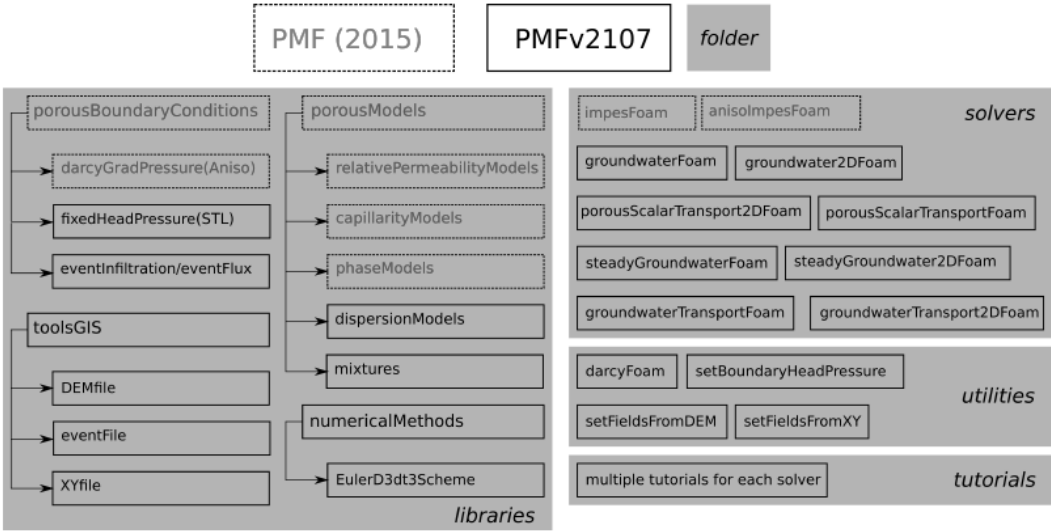


Рис. 3. Общая схема структуры библиотеки porousmultiphaseFoam.
Fig. 3. General scheme of the porousmultiphaseFoam library structure.

К основным возможностям комплекса можно отнести [6-8]:

- 1) набор решателей
 - groundwaterFoam,
 - stationaryGroundwaterFoam,
 - groundwater2DFoam,
 - stationaryGroundwater2DFoam,
 - porousScalarTransportFoam,
 - porousScalarTransport2DFoam,
 - groundwaterTransportFoam,
 - groundwaterTransport2DFoam,

- предназначенных для моделирования потоков подземных вод, в том числе для совместного течения воды и переноса растворенных веществ;
- 2) улучшенные численные методы для задач с сильными нелинейностями;
 - 3) библиотеки/утилиты для предварительной обработки входных данных (для задания информации о ГИС – toolsGIS; модуль для задания форсированных слагаемых в уравнениях, зависящих от времени для описания гетерогенной инфильтрации, локального введение трассирующих веществ);
 - 4) модель учета влияния пассивного или связанного транспорта скаляра в решателях для моделирования грунтовых вод, поддерживающими любое количество веществ;
 - 5) специальные граничные условия для пористых сред (porousBoundaryConditions).

Все решатели были проверены на нескольких (не)насыщенных конфигурационных примерах путем сравнения с результатами, полученными хорошо известным проверенным конечно-элементным кодом [6-8].

Данный ПК “porousMultiphaseFoam” может быть использован для генерации синтетических данных в задачах моделирования течения в пористых почвенных средах с целью дальнейшего обучения на этих данных физически-информированных нейронных сетей.

В решателе groundwaterFoam реализована математическая модель на базе системы уравнений (1-6). Для решения уравнения (2) применяется неявный метод по времени и итерационный метод Пикара.

4. Примеры решения модельных задач

4.1 Пример решения уравнения Ричардса для модельного поля

Рассмотрим пример в программном комплексе ParFlow для моделирования влагопереноса в почвенном поле с заданными свойствами. Размеры поля: 180м по OX, 150м по OY, 8м по OZ. Кол-во элементов разбиения соответственно: 18, 15 и 8.

Рассмотрим исходный файл в формате TCL для запуска в ParFlow. В исходном файле с именем “default_richards.tcl” производится 10 итераций решения на временном промежутке от 0.0 (TimingInfo.StartTime) до 0.010 (TimingInfo.StopTime) секунд с шагом в 0.001с.

Ниже приведены настроечные параметры для расчета:

```
pfset TimingInfo.BaseUnit          1.0
pfset TimingInfo.StartCount        0
pfset TimingInfo.StartTime         0.0
pfset TimingInfo.StopTime          0.010
pfset TimingInfo.DumpInterval      -1
pfset TimeStep.Type                Constant
pfset TimeStep.Value               0.001
```

Параметр TimingInfo.DumpInterval означает время, когда будут генерироваться файлы вывода и записываться результаты расчета. В данном случае параметр равен -1, что означает, что решатель сам будет выбирать, когда делается запись. Также стоит обратить внимание на временные циклы и настроечные параметры:

```
pfset Cycle.Names                  constant
pfset Cycle.constant.Names         "alltime"
pfset Cycle.constant.alltime.Length 1
pfset Cycle.constant.Repeat        -1
```

В нашем случае имеется цикл длиной в 1 секунду (Cycle.constant.alltime.length), и он бесконечно повторяется (Cycle.constant.Repeat -1). В основном данный параметр используется для задания погодных условий, циклично друг друга сменяющих.

Также для решателей задаётся ряд параметров:

pfset Solver	Richards
pfset Solver.MaxIter	5
pfset Solver.Nonlinear.MaxIter	10
pfset Solver.Nonlinear.ResidualTol	1e-9
pfset Solver.Nonlinear.EtaChoice	EtaConstant
pfset Solver.Nonlinear.EtaValue	1e-5
pfset Solver.Nonlinear.UseJacobian	True
pfset Solver.Nonlinear.DerivativeEpsilon	1e-2
pfset Solver.Linear.KrylovDimension	10
pfset Solver.Linear.Preconditioner	MGSEmi
pfset Solver.Linear.Preconditioner.MGSEmi.MaxIter	1
pfset Solver.Linear.Preconditioner.MGSEmi.MaxLevels	100

Для дальнейшей передачи результатов расчета в Paraview требуется сохранять вывод в формате VTK, для чего использованы следующие строки (пример распределения давления представлен на рис. 4):

```
foreach i "00000 00001 00002 00003 00004 00005" {
    set Pdat [pfload -pfb default_richards_wells.out.press.$i.pfb]
    set Sdat [pfload -pfb default_richards_wells.out.satur.$i.pfb]
    pfvtksave $Pdat -vtk "default_richards_wells.out.press.$i.vtk"
    -var "Pressure"
    pfvtksave $Sdat -vtk "default_richards_wells.out.satur.$i.vtk"
    -var "Saturation"
}
```

Здесь в качестве переменных Pdat и Sdat представлены файлы формата .pfb (являющиеся стандартными файлами вывода в ParFlow). Затем используем команду pfvtksave пакета PFTools, для перевода .pfb файлов в формат VTK, где -var – желаемое название для данной переменной в результирующем файле.

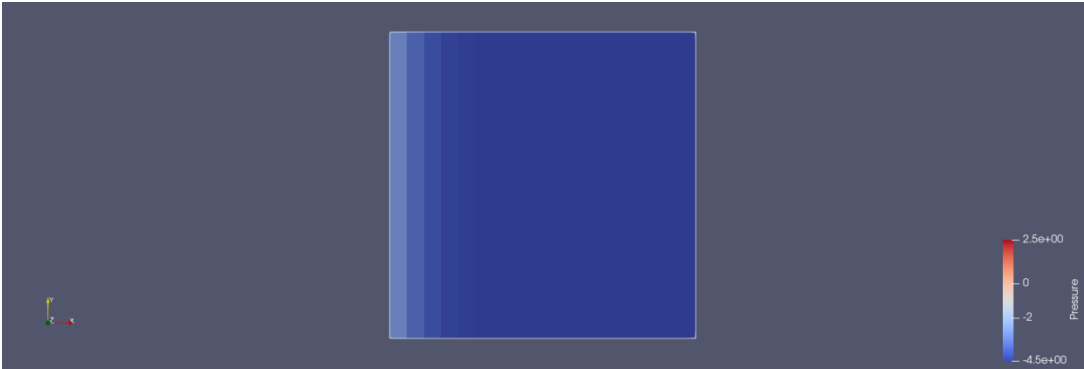


Рис. 4. Поле давления в Paraview.
Fig. 4. Pressure field in Paraview.

4.2 Пример решения уравнения Ричардса для модельного поля со скважиной

Рассмотрим пример в программном комплексе ParFlow для моделирования влагопереноса в почвенном поле со скважиной с заданными свойствами. Размеры поля: 78.8889м по OX, 116.667м по OY, 8м по OZ. Границы: Xmin = -10м; Xmax = 78.8889м; Ymin = 10м; Ymax = 116.667м; Zmin = 1м; Zmax = 9м. Количество элементов разбиения соответственно: 10, 10, 8. Способ задачи скважины представлен следующей последовательностью команд:

```
pfset Wells.Names "pumping_well"
pfset Wells.pumping_well.InputType Vertical
pfset Wells.pumping_well.Action Extraction
```

pfset Wells.pumping_well.Type	Pressure
pfset Wells.pumping_well.X	0
pfset Wells.pumping_well.Y	80
pfset Wells.pumping_well.ZUpper	3.0
pfset Wells.pumping_well.ZLower	2.00
pfset Wells.pumping_well.Method	Standard
pfset Wells.pumping_well.Cycle	"constant"
pfset Wells.pumping_well.alltime.Pressure.Value	0.5
pfset Wells.pumping_well.alltime.Saturation.water.Value	1.0

Соответственно устанавливаются геометрические характеристики скважины (расположение в пространстве и её размер) и, как можно заметить, скважина не сквозная и работает на выкачивание, и её физические параметры – давление и насыщение.

Изначально данная задача предполагает временные промежутки и количество итераций, аналогичные предыдущей. После проведения расчета и перевода результатов в VTK на последнем шаге решения для давления и для насыщения появится картина, показанная на рис. 5. Если же требуется увеличить временной диапазон решения, то следует провести некоторые изменения.

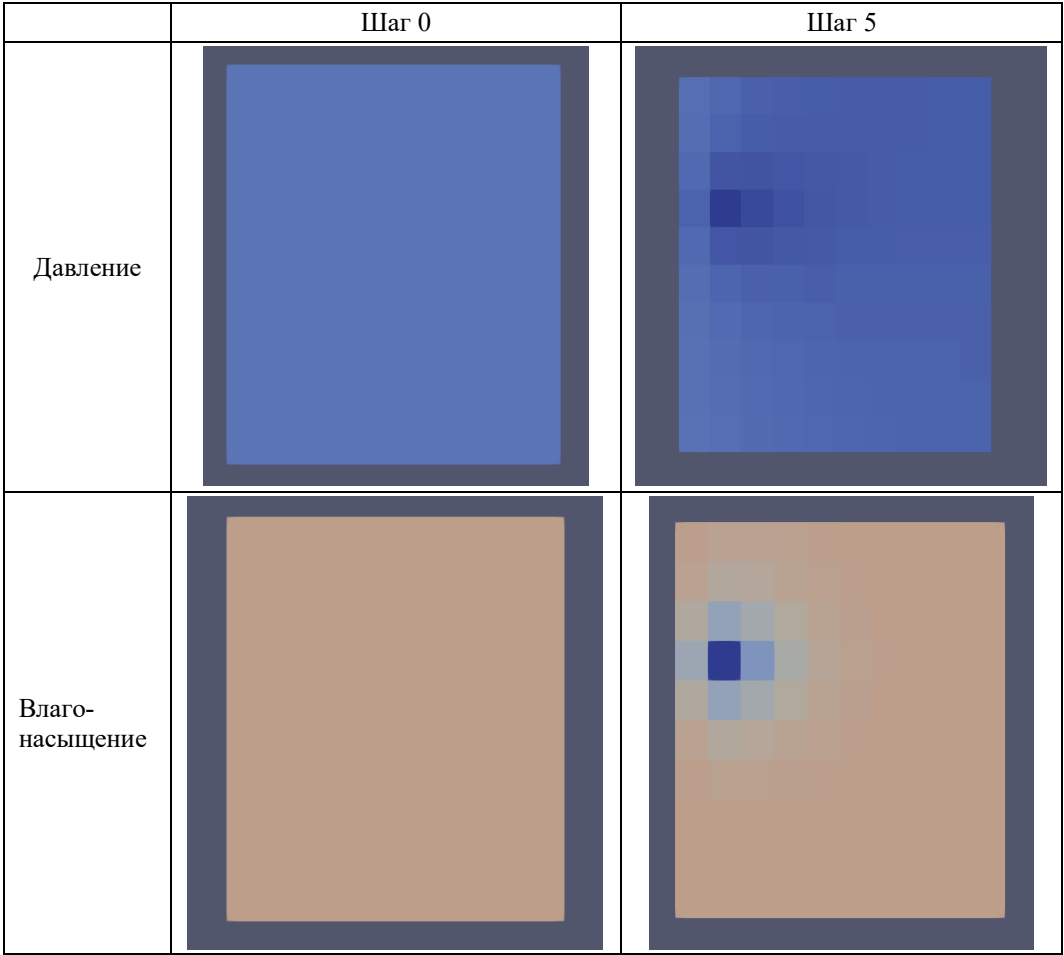


Рис. 5. Поле давления и влагонасыщения в Paraview
Fig. 5. Pressure field and sarturation in Paraview

4.2.1 Временные параметры

Используем следующие настроечные параметры:

```
pfset TimingInfo.BaseUnit 1.0
pfset TimingInfo.StartCount 0
pfset TimingInfo.StartTime 0.0
pfset TimingInfo.StopTime 5.0
pfset TimingInfo.DumpInterval 0.025
pfset TimeStep.Type Constant
pfset TimeStep.Value 0.025
```

Для начала изменим временной отрезок (перенесем конец расчета с 0.010с до 5.0с). Увеличим шаг с 0.001с до 0.025с и установим интервал записи равный 0.025с (вывод результатов на каждом шаге решения).

4.2.2 Параметры цикла

Используем следующие настроечные параметры:

```
pfset Solver Richards
pfset Solver.MaxIter 20
pfset Solver.Nonlinear.MaxIter 20
```

Так как изначально период цикла был равен одной секунде, то мы бы не смогли просчитать временной промежуток от 1с до 5с. Соответственно, изменяется параметр `Cycles.constant.alltime.length`.

4.2.3 Параметры решателя

Так как мы установили `Dumping Interval` равным 0.025с, то у нас при расчете возникнет будет 20 шагов, соответственно изменим временные параметры решателей:

Также данные операции откликнутся и на перевод файлов в формат VTK (нужно увеличить количество преобразуемых файлов):

```
foreach i "00000 00001 00002 00003 00004 00005 00006 00007 00008
          00009 00010 00011 00012 00013 00014 00015 00016 00017
          00018 00019 00020" {
    set Pdat [pfload -pfb default_richards_wells.out.press.$i.pfb]
    set Sdat [pfload -pfb default_richards_wells.out.satur.$i.pfb]
    pfvtksave $Pdat -vtk "default_richards_wells.out.press.$i.vtk"
                    -var "Pressure"
    pfvtksave $Sdat -vtk "default_richards_wells.out.satur.$i.vtk"
                    -var "Saturation"
}
```

Сравнительный рисунок изменения во времени давления и влагонасыщенности представлен на рис. 6.

Также расчет для данной задачи был выполнен на 8-12 ядрах сервера на вычислительном кластере ИСП РАН. Время расчета составило не более 20 минут.

4.3 Пример решения уравнения Ричардса для модельной задачи с использованием решателя groundwaterFoam

4.3.1 Постановка задачи

Рассматривалась возможность использования решателя `groundwaterFoam` в составе библиотеки `porousmultiphaseFoam` для решения нелинейного уравнения Ричардса. Расчетная область с заданной поверхностной топографией имела размеры: 224.4 x 113.2 x 8.5 м.

Количество расчетных ячеек задавалось равным 121x61x10 (рис. 7). Для решения краевой модельной задачи (real-field1) задавались начальные и граничные условия для величин гидростатического напора и скорости. На всех границах задавалось условие Неймана. Нелинейное уравнение Ричардса решалось с использованием метода итераций Пикара. Максимальное количество итераций задавалось равным maxIter=10. Шаг по времени для интегрирования уравнения выбирался равным deltaT=86400 секунд.

Исходные данные для расчетного примера представлены в табл. 1.

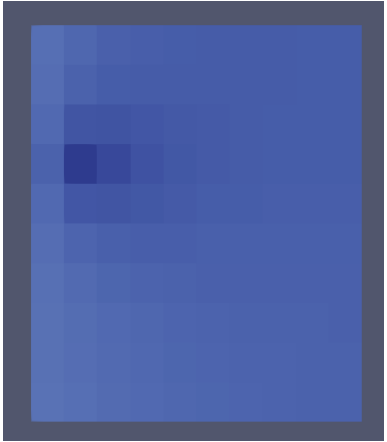
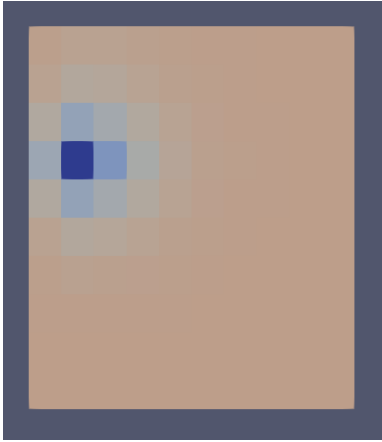
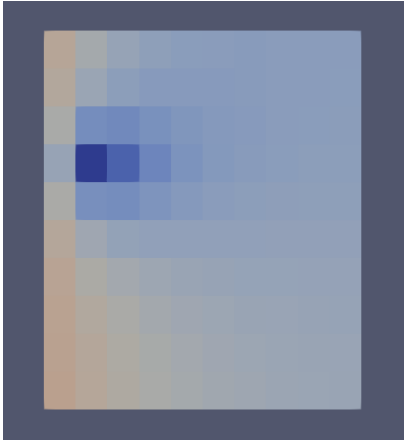
	Шаг 5 предыдущего расчета	Шаг 20 настоящего расчета
Давление		
Влаго-насыщение		

Рис. 6. Поле давления и влагонасыщения для случая со скважиной в Paraview
Fig. 6. Pressure field and sarturation with case with well in Paraview

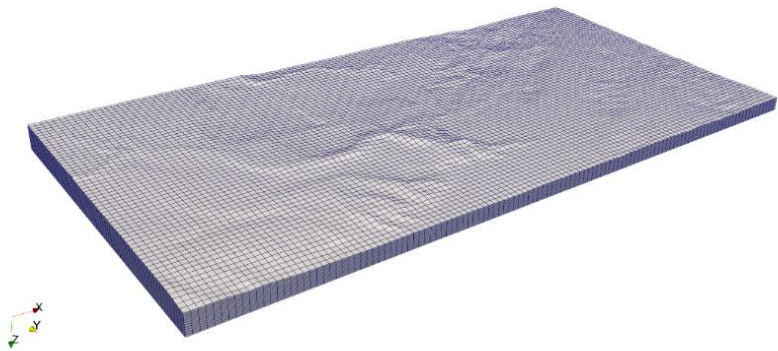


Рис. 7. Расчетная область и сетка.
Fig. 7. Numerical domain and grid.

Табл. 1. Исходные данные для примера “real-field1”.
Table 1. The source data for the “real-field1” example.

viscosity	μ	1.10^{-3}	[Pa.s]
density	ρ	100	[kg.m ⁻³]
Van Genuchten coefficients	m	0.3007	[-]
	α	13.0	[m ⁻¹]
Permeability	K	7.10^{-12}	[m ²]
Kinematic porosity	ε	0.27	[-]
Specific storage	S_S	0.001	[-]

(a) Flow properties

Total porosity	ε_{total}	0.30	[-]
Tortuosity	τ	1	[-]
Molecular diffusivity	D_m	1.10^{-9}	[m ² .s ⁻¹]
Dispersivity coefficient	α_L	1.0	[m]
	α_T	0.2	[m]
Volume partitioning coefficient	K_d	5.10^{-5}	[m ³ .kg ⁻¹]
Radioactive decay coefficient	λ	1.10^{-9}	[s ⁻¹]

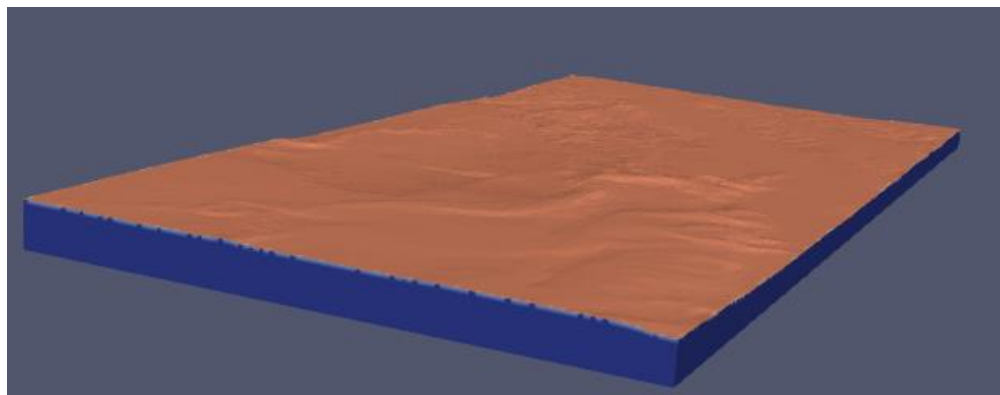
(b) Transport properties

4.3.2 Визуализация результатов расчета в Paraview

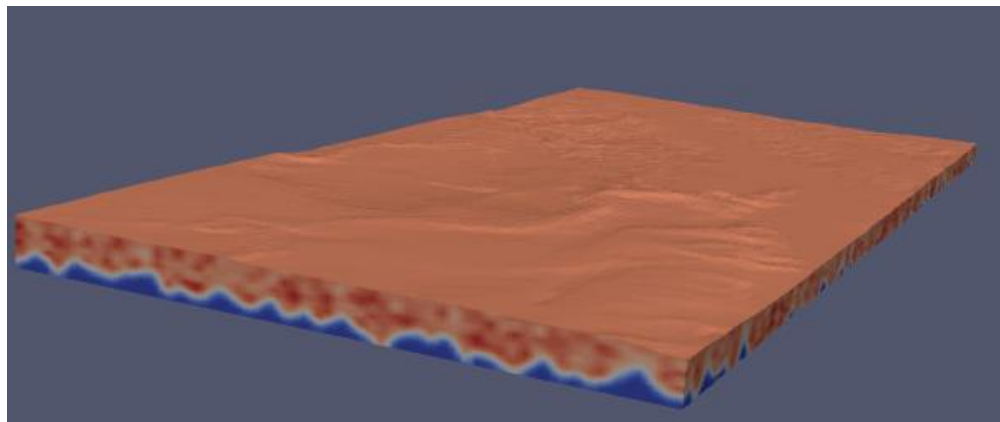
Расчет был проведен для 20 временных срезов для модели поля с заданными почвенными свойствами. В результате вычислений получены значения нескольких переменных (таких, как влагосодержание, гидростатический напор, скорость и т.д.). Распределение влагосодержания в момент времени t=0 представлено на рис. 8a, а в момент времени 172 800 секунд - на рис. 8b. Расчет показал, что процесс распространения влаги завершился за 2.5 календарных суток. Для изучения возможностей API Paraview дополнительно были подготовлены скрипты на языке программирования Python для автоматизации процесса вывода данных в различных сечениях. Была выполнена реализация скрипта для отображения графика, выбранной переменной вдоль заданной траектории, а также скрипта для определения параметров статистики по заданному сечению, ограниченному контуром.

Заключение

Проведенное исследование позволило сделать вывод о возможном использовании программных комплексов ParFlow, OpenFOAM (porousmultiphaseFoam, poreFoam) для изучения процессов в почвенном профиле и микропоровом пространстве с заданными свойствами.



a) $t = 0$ с.



b) $t = 172\,800$ с.

Рис. 8. Поле влагонасыщения для случая со скважиной в Paraview.

Fig. 8. Pressure field and saturation with case with well in Paraview.

Список литературы / References

- [1]. VanDerHorn E., Mahadevan S., Digital Twin: Generalization, characterization and implementation, *Decision Support Systems*, Volume 145, 2021, 113524.
- [2]. Ariesen-Verschuur N., Verdouw C., Tekinerdogan B., Digital Twins in greenhouse horticulture: A review, *Computers and Electronics in Agriculture*, Volume 199, 2022, 107183.
- [3]. Zeng Y and Su Z. Digital twin approach for the soil-plant-atmosphere continuum: think big, model small. *Front Sci.* 2024, 2:1376950.
- [4]. Condon L. E., Maxwell R. M. Implementation of a linear optimization water allocation algorithm into a fully integrated physical hydrology model. *Advances in Water Resources*, 2013, 60:135–147.
- [5]. Condon L. E., Maxwell R. M. Feedbacks between managed irrigation and water availability: diagnosing temporal and spatial patterns using an integrated hydrologic model. *Water Resources Research*, 2014, 50:2600–2616.
- [6]. Horgue P., Soulaire C., Franc J., Guibert R., Debenest G. An open-source toolbox for multiphase flow in porous media. *Computer Physics Communications*, 187:217–226, 2015.

- [7]. Horgue P., Renard F., Gerlero G.S., Guibert R., Debenest G. porousMultiphaseFoam v2107: An open-source tool for modeling saturated/unsaturated water flows and solute transfers at watershed scale, *Computer Physics Communications*, Volume 273, 2022, 108278.
- [8]. Romanova D., Strijhak S., Koshelev K., Kraposhin M. Modeling the Reservoir Flooding Problem Using the Extended Version of the PorousMultiphaseFoam Library. 2019 Ivannikov Ispras Open Conference (ISPRAS). 05-06 December 2019, DOI: 10.1109/ISPRAS47671.2019.00025.
- [9]. Пачепский Я.А. Математические модели процессов в мелиорируемых почвах. Изд-во Моск.ун-та, 1992.85 с.
- [10]. Шейн Е.В. Курс физики почв. Изд-во Моск.ун-та, 2005. – 432 с.
- [11]. Шейн Е.В., Рыжова И.М. (2016). Математическое моделирование в почвоведении. Учебник. – И.: Изд-во ИП «Маракушев», 2016. – 400 с.
- [12]. Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. Изд. ФИЗМАТЛИТ. 2001. 608 с.

Информация об авторах / Information about authors

Константин Борисович КОШЕЛЕВ – кандидат физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник Института системного программирования им. В.П. Иванникова РАН с 2016 года. Сфера научных интересов: вычислительная гидродинамика, гидрология, машинное обучение.

Konstantin Borisovich KOSHELEV – Cand. Sci. (Phys.-Math.), associate professor, senior researcher at the Ivannikov Institute for System Programming of the RAS since 2016. Research interests: computational fluid dynamics, hydrology, machine learning.

Андрей Всеволодович КУЛИНСКИЙ – старший лаборант Института системного программирования им. В.П. Иванникова РАН с 2024 года. Сфера научных интересов: машинное обучение, глубокое обучение, математическое моделирование, большие данные, научная визуализация.

Andrei Vsevolodovich KULINSKII – senior laboratory assistant of the Ivannikov Institute for System Programming of the RAS since 2024. Research interests: machine learning, deep learning, mathematical modeling, big data, scientific visualization.

Сергей Владимирович СТРИЖАК – кандидат технических наук, ведущий инженер Института системного программирования им. В.П. Иванникова РАН с 2009 года. Сфера научных интересов: вычислительная гидродинамика, многофазные течения, турбулентность, ветроэнергетика, машинное обучение, параллельные вычислительные системы.

Sergei Vladimirovich STRIJHAK – Cand. Sci. (Tech.), leading engineer of the Ivannikov Institute for System Programming of the RAS since 2009. Research interests: computational fluid dynamics, multiphase flows, turbulence, wind energy, machine learning, parallel computing.