Videla, D. y Salazar, I. (2010). Comparación del método de Crank Nicholson y α - generalizado aplicados a la ecuación de flujo de aguas subterráneas. Obras y Proyectos 7, 51-56

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial h}{\partial x}$$

Comparación del método de Crank Nicholson y α-generalizado aplicados a la ecuación de flujo de aguas subterráneas

Comparison of the Crank Nicholson and generalized - α methods applied to the groundwater flow equation

Fecha de entrega: : 17 de Diciembre 2009
Fecha de aceptación: 25 de Mayo 2010

Daniela Videla e Iván Salazar

Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft, RWTH Aachen, Mies van der Rohe Strasse 1, 52056 Aachen, Alemania, daniela.videla@gmail.com, salazar-castillo@iww.rwth-aachen.de

El presente artículo es una revisión y comparación de dos métodos numéricos para resolver la parte transiente en un problema de flujo a través de un medio poroso saturado. La parte transiente de la ecuación fundamental de flujo en un medio poroso en 1D es resuelta utilizando dos esquemas de integración temporal: el método de Crank Nicholson y el método α-generalizado, mientras que la componente espacial de la ecuación es discretizada a través del método de los elementos finitos. Si bien es cierto que ambos métodos son incondicionalmente estables, la exactitud de la metodología de Crank Nicholson depende de la relación existente entre el tamaño Δx de los elementos discretizados y del tamaño Δt del paso del tiempo, aunque principalmente del valor de Δt, mientras que en el método α-generalizado depende además de tres parámetros propios de dicho esquema. Se compara la exactitud de ambos métodos para distintos valores de Δx y Δt. Además para el método α-generalizado se analiza la influencia que tienen dos de sus tres parámetros en la exactitud de la solución.

Palabras clave: discretización, flujo de aguas subterráneas, método α-generalizado, método de Crank Nicholson, método de elementos finitos

This article is a revision and comparison of two numeric methods used to solve the transient part of the problem of flow through a saturated, porous medium. The transient part of the fundamental flow equation in a porous medium in one dimension is solved using two temporary integration schemas: the Crank Nicholson method and the generalized α-method. The spatial component of the equation is discretized using the finite element method. Even though both methods are traditionally stable, the precision of the methodology of the Crank Nicholson depends on the existing relationship between the Δx size of the discretized elements and the size Δt of the flow of time (albeit mostly dependent on the size of Δt), while in the α-generalized method it depends additionally of three parameters exclusive of this schema. The precision of both methods is compared for different values of Δx and Δt. Additionally, for the alpha method, the influence of two of the three parameters in the precision of the solution is analyzed.

Keywords: discretization, groundwater flow, Crank Nicholson and α-generalized methods, finite element method

Introducción

En la actualidad la modelación numérica es una herramienta importante cuando se quiere estudiar algún fenómeno o predecir su evolución bajo ciertas condiciones de control de interés. En ese ámbito la exactitud y la representación juegan un papel muy importante a la hora de tomar decisiones, por ejemplo el éxito potencial en el diseño de sistemas de remediación basados en la extracción y tratamiento de aguas subterráneas es difícil lograrlo sin haber realizado unas cuantas simulaciones para mejorar el conocimiento de los procesos que lo controlan. En busca de obtener resultados que reflejen de mejor forma la realidad se intensifican las técnicas numéricas tanto para la descripción espacial como temporal, sobre todo para situaciones cuya solución por métodos analíticos no son posibles. De esta forma por ejemplo para la aproximación espacial se utiliza frecuentemente el método de diferencias finitas, el

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} K_x$$

método de elementos finitos y el método de volúmenes finitos, mientras que para la aproximación temporal depende fuertemente del tipo de ecuación que se presenta. Problemas numéricos que son representados por una ecuación del tipo difusivo, como el visto en el presente trabajo, son tratados frecuentemente a través del método de Crank Nicholson, el cual se basa en un esquema de diferencias finitas. Sin embargo, lo anterior no impide la aplicación de algún otro método alternativo, si éste ofrece una mayor flexibilidad y sobre todo si es posible obtener una mejor exactitud en sus resultados.

Formulación del problema

La ecuación de flujo en medios porosos nace de imponer en un volumen de control el principio de conservación de masa y además de considerar que el movimiento del agua es representado mediante la ley de Darcy. La conservación de masa sobre el volumen de control conlleva a la siguiente expresión:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\eta \cdot \rho) = -\nabla \cdot (\rho \cdot v_f) \pm \rho \cdot Q \qquad (1)$$

donde η [-] corresponde a la porosidad total, ρ [ML^{-3}] es la densidad del líquido en cuestión, v_f [LT^{-1}] es la velocidad de filtración y Q [1/T] representa los términos de fuente/sumidero. Por su parte la velocidad de filtración viene dada por la expresión de Darcy, a saber:

$$v_i = -K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_i} \qquad (2)$$

donde K_{ij} [LT^{-1}] corresponde al tensor conductividad hidráulica del medio y h indica el nivel piezométrico.

Introduciendo el concepto de almacenamiento específico (Bear 1972) y suponiendo que la densidad sólo es función de la presión se llega a:

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} = Q \qquad i, j = 1,2,3 \qquad (3)$$

donde S_S [L^{-1}] corresponde al coeficiente de almacenamiento específico. La ecuación (3) determina el comportamiento del flujo en medios porosos en tres dimensiones y para su resolución es necesario imponer condiciones iniciales y de contorno adecuadas. En general los acuíferos son bidimensionales por lo que es frecuente resolverla para casos prácticos en un espacio bidimensional, aunque para propósitos del presente trabajo es presentada en su forma unidimensional.

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial h}{\partial x} \qquad (4)$$

en donde intencionalmente se ha despreciado el termino de sumidero/fuente. La ecuación (4) determina el comportamiento del flujo en un medio poroso unidimensional, ya sea saturado o parcialmente saturado y en régimen no estacionario.

Se considera un medio continuo con dominio Ω y bordes Γ siendo n el vector normal unitario a Γ. El dominio Ω es considerado unidimensional de longitud L y área transversal constante, mientras que en ambos bordes Γ se consideran conocidas las alturas de carga. De esta forma la formulación del problema que se nos presenta, flujo a través de un medio poroso saturado, isotrópico y homogéneo, de sección transversal constante, queda representado en su forma diferencial fuerte como sigue:

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial h}{\partial x}$$

Con condiciones de bordes e inicial

$$\begin{aligned} h(0,t) &= h_1 \\ h(L,t) &= h_2 \\ h(x,t=0) &= 0 \end{aligned} \qquad (5)$$

Premultiplicando la ecuación (5) por una altura de carga virtual δ_h, la cual se considera nula en la frontera (en analogía con la mecánica de sólidos), integrando en el dominio $[0, L]$ y utilizando el teorema de Gauss, se obtiene la forma débil del problema:

$$\int_0^L \frac{d}{dx}(\delta h) \cdot \left(K \frac{dh}{dx} \right) dx + \delta h(L) \cdot v(L) - \delta h(0) \cdot v(0) =$$

$$-\int_0^L \delta h \cdot S_S \frac{dh}{dt} dx \qquad (6)$$

Aproximación espacial y temporal de la ecuación de flujo

La ecuación (6) corresponde a un problema con valor de frontera, y como fue mencionado, se acostumbra aproximar la derivada espacial a través del método de elementos finitos, mientras que para la derivada temporal se suelen usar esquemas de diferencias finitas. Al aplicar elementos finitos a la región espacial, es decir, discretización del problema en elementos para la región $[0, L]$, aproximación del vector de carga mediante funciones de forma, cálculo por elemento de la matriz y vectores de participación y

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial h}{\partial x}$$

ensamblaje por elemento para toda la región de análisis, se obtiene finalmente para nuestro problema la siguiente expresión matricial:

$$M\dot{h} + K\,h = F \qquad h(0) = h_0 \tag{7}$$

Aproximación temporal a través del método α-generalizado

El método α-generalizado es un esquema numérico, el cual tiene su origen en el área de la dinámica estructural para resolver problemas diferenciales de segundo orden con el fin de poder controlar las frecuencias de dichos sistemas (Hilbert *et al.*, 1977; Hughes, 1987; Chung y Hulbert, 1993). Su aplicación en la resolución de problemas diferenciales de primer orden no es común, ya que con frecuencia se utiliza el método de Crank y Nicholson (1974). Jansen *et al.* (2000) hace una extensión para un caso no lineal, en donde resuelve un caso particular de las ecuaciones de Navier Stokes. El método α-generalizado en un intervalo de tiempo $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ para un paso α, viene dado por las siguientes cuatro expresiones:

$$\dot{y}_{n+\alpha_m} = \lambda\, y_{n+\alpha_f}$$

$$y_{n+\alpha_f} = y_n + \alpha_f (y_{n+1} - y_n)$$

$$\dot{y}_{n+\alpha_m} = \dot{y}_n + \alpha_m (\dot{y}_{n+1} - \dot{y}_n) \tag{8}$$

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t\, \dot{y}_n + \Delta t\ \ \gamma (\dot{y}_{n+1} - \dot{y}_n)$$

Mientras que los parámetros que definen la estabilidad, exactitud de orden local y disipación numérica vienen dados por:

Estabilidad condicional $\quad \alpha_m \geq \alpha_f \geq 1/2$

Exactitud de segundo orden $\quad \gamma = 1/2 + \alpha_f - \alpha_m$ (9)

Disipación numérica óptima $\quad \alpha_m = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{3 - \rho_\infty}{1 + \rho_\infty} \right)$

$$\alpha_f = \frac{1}{1 + \rho_\infty}$$

donde α_m, α_f y γ son parámetros libres, mientras ρ_∞ corresponde al radio espectral en el límite cuando el paso de tiempo Δt tiende a infinito (Chung y Hulbert, 1993; Jansen *et al.* 2000). Al aplicar las ecuaciones presentadas en (8) en la parte temporal de la ecuación (7) resulta:

$$\Delta h \left(M \frac{\alpha_m}{\Delta t\ \ \gamma} + K \alpha_f \right) = F_n + \alpha_f (F_{n+1} - F_n) \tag{10}$$

$$- M\ \ \dot{h}_n \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \right) \alpha_m - M\ \ \dot{h}_n (1 - \alpha_m) - K\ \ h_n$$

con $\Delta h = h_{n+1} - h_n$ donde n indica el paso del tiempo. La ecuación (10) corresponde a la expresión de recurrencia para el problema en cuestión, donde en cada paso del tiempo se obtiene el valor de Δh en forma vectorial para cada nudo en consideración.

Aproximación temporal a través del método de Crank Nicholson

El método de Crank-Nicholson es un esquema de aproximación de segundo orden centrado en el tiempo, implícito e incondicionalmente estable. Es el método más usado para aproximar la derivada temporal en problemas diferenciales de primer orden y corresponde a una aproximación por diferencias finitas centrales en el punto medio del paso del tiempo. De esta forma con esa técnica se logra que la diferencia de órdenes de las aproximaciones por diferencias finitas para la derivada temporal tenga el mismo orden que la aproximación espacial. Al aproximar la parte temporal de la ecuación (7) a través del método de Crank Nicholson e incorporando las condiciones de borde dentro del esquema total, se llega a la expresión de recurrencia:

$$-r\ \ h_{i+1}^{j+1} + 2\ (1+r)\ h_i^{j+1} - r\ \ h_{i-1}^{j+1} = r\ \ h_{i+1}^{j} + 2\ (1-r)\ h_i^{j} + r\ \ h_{i-1}^{j} \tag{11}$$

con $r = K\ \ \Delta t / S_S\ \ (\Delta x)^2$, donde j indica el paso del tiempo e i el nudo en consideración. La gran ventaja que presenta este método es que es estable para cualquier valor de r aunque para valores más pequeños suele proporcionar mejor exactitud. Finalmente la ecuación (11) puede escribirse de una forma matricial iterativa más conocida, a saber:

$$\frac{1}{\Delta t}\ \ M\ \ (h_{n+1} - h_n) + \frac{1}{2}\ \ K\ \ (h_{n+1} + h_n) = \frac{1}{2}\ \ (F_{n+1} + F_n) \tag{12}$$

donde nuevamente n indica el paso del tiempo.

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial h}{\partial x}$$

Comparación de los métodos

El medio poroso es modelado como una sección finita de longitud L = 1, área transversal constante y con las condiciones de contorno e inicial siguiendo el esquema presentado en las expresiones (5). El medio se ha discretizado inicialmente en 4 elementos lineales de longitud $\Delta x = L / 4$. El medio se considera homogéneo, isotrópico y saturado cuyos valores de los parámetros se indican en la Tabla 1.

Tabla 1: Parámetros considerados (Videla, 2010)

Conductividad hidráulica K_x, m/s	$7{,}2 \cdot 10^{-5}$
Gradiente hidráulico, %	0,03
Densidad del fluido, kg/m^3	1000
Coeficiente de almacenamiento específico S_s, 1/m	$6 \cdot 10^{-4}$
Altura inicial h_0, m	10

El método de los elementos finitos se ha utilizado para la aproximación espacial mientras que para la aproximación temporal se utilizaron los métodos de Crank Nicholson y α-generalizado. Los resultados son presentados en forma adimensional, dividiendo la altura aproximada por la altura inicial h/h_0. Para ver el comportamiento de ambos esquemas se realizan primeramente dos series: la primera muestra la situación de ambos esquemas ante una variación del tamaño Δx del elemento, manteniendo un paso Δt constante con valor unitario. La segunda serie muestra el comportamiento de ambos esquemas cuando se mantiene constante del tamaño Δx del elemento y se varía el tamaño Δt del paso del tiempo. Una tercera serie deja de manifiesto el comportamiento de la solución entregada por el método alfa al variar la relación de dos de sus tres parámetros (α_f, α_m), mientras se mantiene el valor de γ constante e igual a 0,5 (valor por defecto). El programa comercial MATLAB se ha utilizado para el desarrollo del modelo.

I) Serie 1: Variación de Δx, para Δt =1día

De la Figura 1 se desprende que al variar la variable Δx, los métodos muestran un comportamiento irregular. Si bien es cierto que ambas soluciones convergen, tanto el método de Crank Nicholson como el α-generalizado para el caso a) (Δx = 0,1 m) presentan oscilaciones iniciales aunque se mantiene la estabilidad. El método de Crank Nicholson acusa variaciones en torno al valor correcto, mientras que en el esquema α- generalizado se observa una gran oscilación inicial y luego una convergencia veloz hacia la solución. Se desprende además que esta variación del tamaño del elemento tiene una influencia en la tendencia en la curvatura de cada uno, aunque finalmente convergen a la misma solución. El caso b) presenta una mejor aproximación de la solución al ser comparada con la solución analítica (Figura 2).

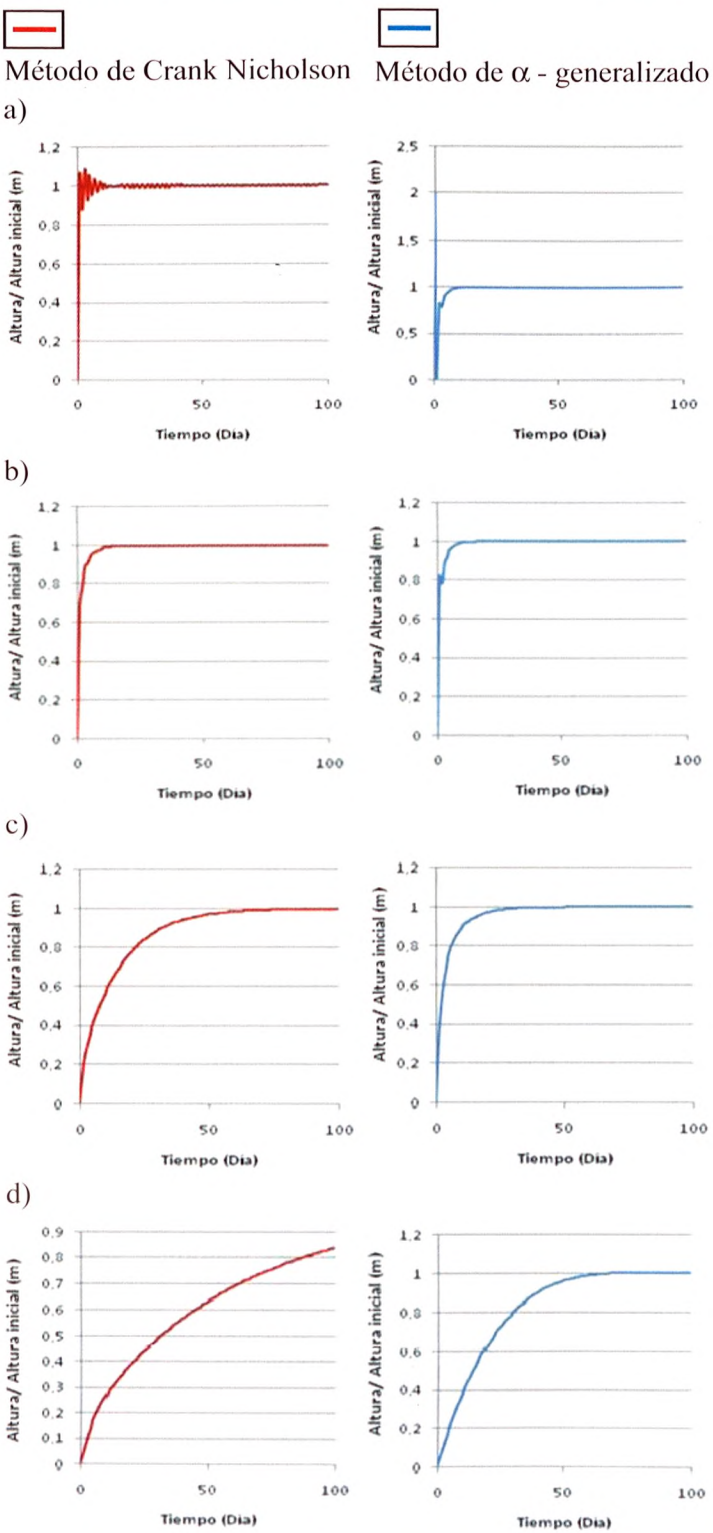

Figura 1: Efecto de la variación del espaciamiento Δx en la solución numérica determinadas por el método Crank Nicholson y α- generalizado para un Δt constante e igual a 1. Casos: a) Δx = 0,1 m b) Δx = 0,25 m c) Δx = 0,5 m y d) Δx = 1 m

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial h}{\partial x}$$

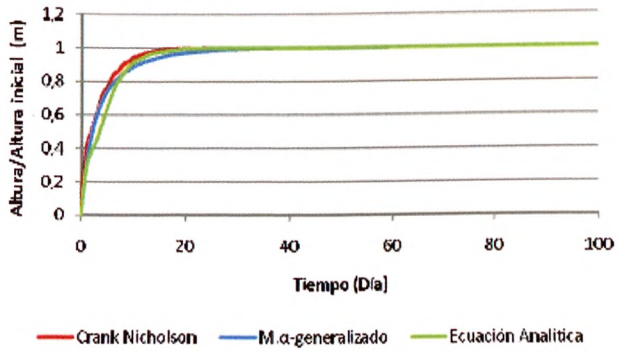

Figura 2: Comparación de las soluciones aproximadas con la solución analítica para Δt = 1 día y Δx = 0,25 m. Se aprecia que la curvatura de la solución entregada por ambos esquemas numéricos se aproxima de buena manera a la solución exacta.

II) Serie 2: Variación de Δt , para Δx = 0,25 m

De la Serie I) se ha mantenido el valor de Δx = 0,25 constante al presentar una aproximación aceptable en relación a la entregada por la solución analítica, por lo que el enfoque está en el comportamiento de los esquemas numéricos ante una variación del paso del tiempo Δt.

Método de Crank Nicholson Método de α - generalizado

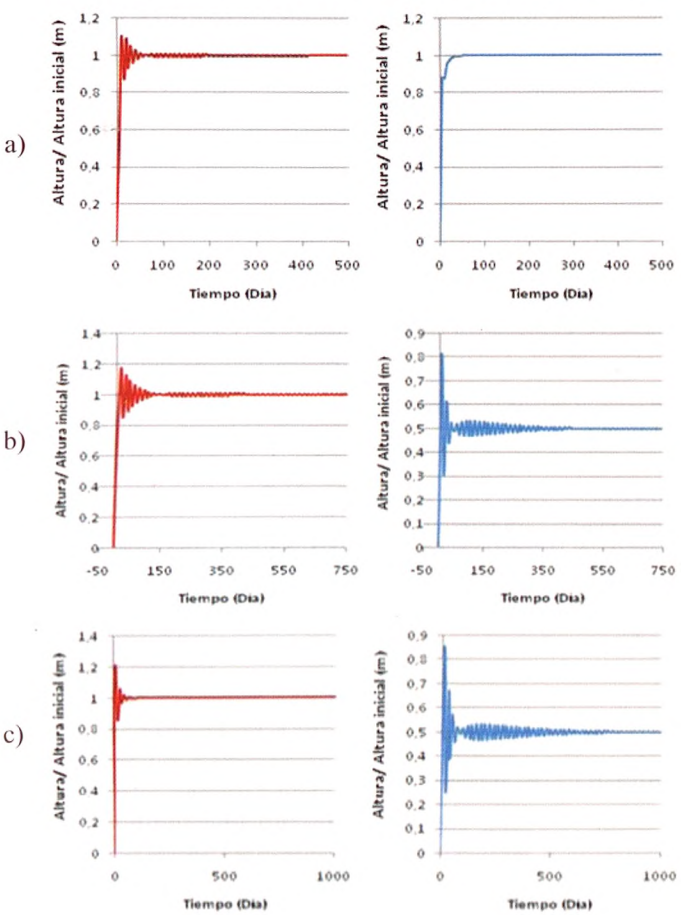

Figura 3: Efecto de la variación del paso del tiempo Δt en la solución numérica determinadas por el método α- generalizado y Crank Nicholson para un espaciamiento Δx constante e igual a 0,25 m. Casos a) Δt =5 días b) Δt = 7,5 días y c) Δt = 10 días

La Figura 3 deja en evidencia la sensibilidad de ambos esquemas numéricos ante la variable Δt, dado que a valores muy grandes los métodos tienden a oscilar al inicio de la curva. Para intervalos de tiempo superiores los métodos tienden a oscilar con amplitudes mayores. En el esquema de Crank Nicholson, todos los casos convergen a la solución, aunque son evidentes las oscilaciones numéricas. En cambio en el esquema α-generalizado se presenta una situación de divergencia en los pasos de tiempo Δt = 7,5 y Δt = 10, es decir, no se logra la solución. Esto se puede deber a los errores locales generados en cada aproximación y que afectaron a la convergencia del método (ver Jansen *et al.* 2000).

III) Serie 3: Variación de los parámetros α_f y α_m con γ = 0,5

En el método α-generalizado, los parámetros que definen la estabilidad, exactitud de orden local y disipación numérica vienen dados por las ecuaciones (9). Chung y Hulbert (1993) y Jansen *et al.* (2000) determinaron que la estabilidad requiere que se cumpla la relación $\alpha_m > \alpha_f > 1/2$. No obstante, resulta importante observar el comportamiento de la solución ante una variación de estos parámetros, manteniendo constante el tamaño del elemento Δx = 0,5 y el paso del tiempo Δt = 1.

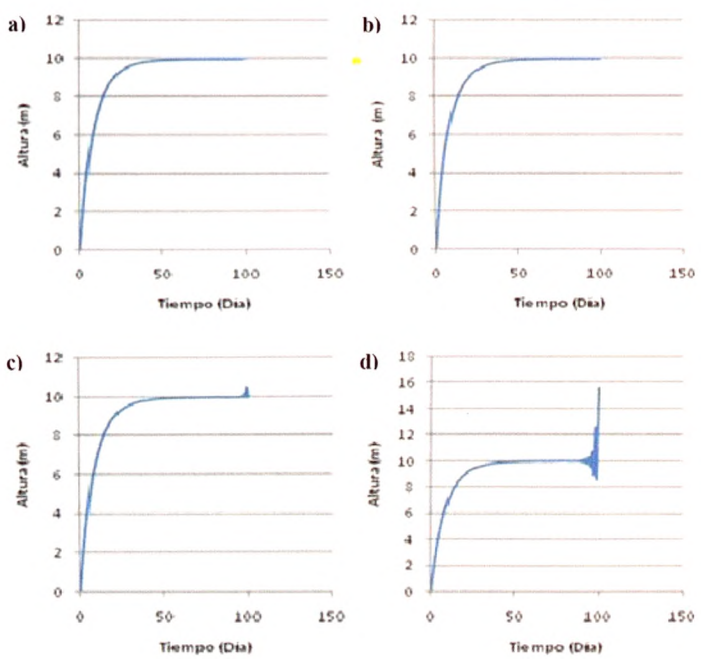

Figura 4. Efecto de los parámetros α_f y α_m en la solución numérica dada a través del método α-generalizado, para un paso del tiempo Δt = 1 y un espaciamiento Δx constante e igual a 0,5 Casos: a) $\alpha_m = \alpha_f$ = 0,5, b) $\alpha_m = \alpha_f$ = 0,55, c) $\alpha_m = \alpha_f$ = 0,58 y d) $\alpha_m = \alpha_f$ = 0,6

$$S_S \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} K_x$$

La Figura 4c muestra el comienzo de divergencia para $\alpha_m = \alpha_f = 0{,}58$. Por lo tanto, a la luz de estos resultados los valores de los parámetros α_m y α_f no debieran ser mayores a 0,6. La amplitud de divergencia tiende a disminuir al aumentar Δx (Videla 2010).

Conclusiones

Se han implementado las soluciones numéricas de la ecuación diferencial de flujo para un caso particular de flujo en medios porosos. La parte espacial se ha discretizado por el método de los elementos finitos, mientras que para la parte temporal se utilizaron los métodos numéricos de Crank Nicholson y α- generalizado. Los resultados se han comparado en las Figuras 1 a 3. Para este problema en particular ambos métodos reproducen resultados similares, aunque a simple vista el método que se ha ajustado mejor a un caso particular de la solución analítica ha sido el de Crank Nicholson (Figura 2).

Se ha evidenciado que ambos métodos numéricos son sensibles tanto a la variación del tamaño Δx del elemento como al paso del tiempo Δt. La sensibilidad producto del cambio de Δx no afectó a la convergencia de la solución para ambos esquemas, aunque si hubo oscilaciones iniciales. La sensibilidad ante la variación del paso del tiempo Δt para el esquema de Crank Nicholson fue en aumento a medida que se aumentaba el paso Δt, entregando resultados poco satisfactorios y oscilantes al inicio, aunque finalmente la solución fue convergente, mientras que para el método α-generalizado, sólo un caso tuvo un comportamiento aceptable (caso a), Figura 3), en cambio los otros dos casos (casos b) y c), Figura 3), aparte de presentar resultados poco satisfactorios y oscilantes no convergieron a la solución.

Dos parametros intrínsicos del método α-generalizado, α_m y α_f se han variado con la finalidad de ver si la solución es sensible a estos parametros. La solución es deficiente cuando ambos parámetros adoptan el valor de 0,6 ($\alpha_m = \alpha_f = 0{,}6$).

Tanto el método de Crank Nicholson como el α-generalizado presentan una buena aproximación (para un Δx y Δt apropiados). Se recomienda aplicar el método α-generalizado a otras situaciones y ver su comportamiento.

Agradecimientos

El presente trabajo forma parte del proyecto de investigación Modelación de flujo de contaminantes en medios porosos, desarrollado en la RWTH, Aachen. El primer autor desea expresar un especial agradecimiento por el apoyo brindado por el programa DAAD y la Universidad Católica de la Santísima Concepción durante su investigación en Alemania en la Universidad RWTH Aachen.

Referencias

Bear, J. (1972). *Dynamics of fluids in porous media*. Elsevier, New York

Chung, J. and Hulbert, G. M. (1993). A Time Integration Algorithm for Structural Dynamics with Improved Numerical Dissipation: The Generalized- α Method. Journal of Applied Mechanics

Crank, J. and P. Nicholson (1974), A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat conduction type. Proc. Camb. Phil. Soc. 43: 50–67.

Hilbert, H. M., Hughes, T. J. R. and Taylor, R.I. (1977). Improved Numerical Dissipation for Time Integration Algorithms in Structural Dynamics. *Earthquake Engineering and Structural Dynamics*, Vol.5

Hughes T.J. R. (1987). *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. Prentice – Hall, Englewood Cliffs, New Jersey

Jansen, K. E., Whiting, C. H. and Hulbert, G. M. (2000). A Generalized-α Method For Integrating The Filtered Navier-Stokes Equations With A Stabilized Finite Element Method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190:305-319

Videla, D. (2010). Comparación de 2 métodos numéricos, método α-generalizado y Crank Nicholson, aplicados a la ecuación de flujo y transporte de contaminantes en medios porosos. Memoria para optar al título de Ingeniero Civil, Universidad Católica de la Santísima Concepción, Chile.