

SOCIEDAD CHILENA DE INGENIERIA HIDRAULICA

VIII CONGRESO NACIONAL

ALCANCES SOBRE LA INESTABILIDAD EN SOLUCIONES NUMERICAS DE
TRANSPORTE DE MASAS EN AGUAS SUBTERRANEAS

GUILLERMO CABRERA F. (1)

CRISTIAN STRICKLER H. (2)

RESUMEN

Mediante la aplicación de un modelo de elementos finitos isoparamétricos que describe el movimiento y distribución de una substancia conservativa disuelta en un flujo saturado de aguas subterráneas, a los casos de flujos unidireccionales con dispersión longitudinal y dispersión longitudinal y transversal, se analizó el problema de convergencia y estabilidad que generalmente presentan estas soluciones numéricas.

Los resultados obtenidos permitieron verificar que no existe variación en las soluciones al utilizar funciones de primero, segundo o tercer grado en la aproximación de elementos finitos. Por otra parte, se concluyó que sólo es posible encontrar soluciones ajustadas o confiables si, por un lado, el efecto lateral de la dispersión es poco importante frente a la longitudinal, y por otro, si los números de Peclet y de Courant toman valores bajo ciertos límites definidos; en lo relativo al número de Peclet esto resulta esencial para evitar la generación de soluciones totalmente inestables.

(1) Ingeniero Civil, Profesor e Investigador del Centro de Recursos Hidráulicos, Departamento de Ingeniería Civil, Universidad de Chile.

(2) Ingeniero Civil, Ayudante de Investigación del Centro de Recursos Hidráulicos, Departamento de Ingeniería Civil, Universidad de Chile.

1. INTRODUCCION.

En un trabajo anterior (Cabrera, 1985) se presentó el desarrollo de un modelo de elementos finitos que permite simular el movimiento y distribución de una sustancia conservativa disuelta en un flujo saturado de aguas subterráneas; para ello se consideró el método residual de Galerkin en conjunto con una discretización espacial de elementos triangulares. El modelo elaborado se validó teóricamente con la solución analítica del transporte de masas en un flujo unidireccional y se aplicó posteriormente al caso de un sistema de disposición de relaves, para determinar el efecto de filtraciones con alto contenido de algunos compuestos a través del muro de embalse, cuando estos actúan sobre las aguas subterráneas naturales.

De los resultados obtenidos en ese trabajo se concluyó que una mejor respuesta en cuanto a convergencia y estabilidad debería conseguirse, en primer lugar, si se trabajara con funciones de aproximación de mayor grado dentro de cada elemento, y posiblemente incorporando diferentes ponderadores en los términos dispersivos en el planteamiento numérico. En el presente trabajo se analiza la primera de estas posibilidades, la que se ha materializado en un modelo de elementos finitos cuadriláteros isoparamétricos que considera funciones de aproximación de primer, segundo y tercer grado para representar la distribución de la concentración; la integración en el tiempo se efectuó mediante un esquema de diferencias hacia atrás. El análisis se ha realizado aplicando el modelo a flujos unidireccionales con dispersión longitudinal únicamente y con dispersión longitudinal y transversal; se ha planteado como un análisis de sensibilidad resolviendo un cierto caso con una malla con elementos lineales, cuadráticos o cúbicos, o bien variando la longitud de los intervalos de tiempo y el tamaño de los elementos.

2. PLANTEAMIENTO DEL MODELO.

Para caracterizar el movimiento y distribución de una sustancia conservativa disuelta en un sistema acuífero saturado, debe resolverse secuencialmente la ecuación del flujo subterráneo y la ecuación de transporte de masas. De la primera de ellas se obtiene las componentes de velocidad que se incluye en la segunda como datos conocidos para su solución.

En el caso de usar el método de elementos finitos con funciones de aproximación de primer grado, la velocidad resulta ser una constante; sin embargo, en caso que se use funciones de mayor grado, las velocidades o sus componentes dentro de cada elemento son una función de la posición y de los valores del potencial hidráulico en los nudos. Por esta razón, las relaciones que utiliza el modelo numérico cuando se trabaja con elementos finitos isoparamétricos son diferentes, al igual que el acoplamiento de los modelos de flujo y de transporte de masas.

En forma general, la formulación de elementos finitos del sistema de transporte de masas puede caracterizarse por las siguientes ecuaciones matriciales compactas (Strickler y Cabrera, 1987):

i) Ecuación del flujo para el potencial h

$$A \dot{h} + B h + q = 0 \quad (1)$$

en que los distintos coeficientes tienen las expresiones siguientes:

$$A_{ij} = \int_D S^{(e)} v_i v_j dD \quad (2a)$$

$$B_{ij} = \int_D \left(T_x^{(e)} \frac{\partial v_i}{\partial x} \frac{\partial v_j}{\partial x} + T_y^{(e)} \frac{\partial v_i}{\partial y} \frac{\partial v_j}{\partial y} \right) dD \quad (2b)$$

$$g_i = - \int_{\Gamma} T_n^{(e)} v_i \frac{\partial h}{\partial n} d\Gamma \quad (2c)$$

siendo $T_n^{(e)}$ el valor que toma la transmisibilidad del elemento en la dirección n , $S^{(e)}$ es el coeficiente de almacenamiento, D es el dominio elemental o elemento cuadrilátero, v_i y v_j son las funciones de interpolación básicas del elemento, y $T_n^{(e)}$ es la transmisibilidad en la dirección n normal al borde Γ del sistema.

ii) Ecuación de las velocidades V en las direcciones x e y :

$$S \frac{V_x}{dx} = \frac{d}{dx} \quad (3a)$$

$$S \frac{V_y}{dy} = \frac{d}{dy} \quad (3b)$$

en que los elementos típicos de las matrices son

$$S_{ij} = \int_D v_i v_j dD \quad (4a)$$

$$d_{xi} = - \int_D K_x^{(e)} v_i \left(\sum_l h_l \frac{\partial v_l}{\partial x} \right) dD \quad (4b)$$

donde $K_x^{(e)}$ es la permeabilidad del medio poroso en la dirección x , y l es el subíndice que identifica cada nudo dentro del elemento considerado.

iii) Ecuación de transporte de masas en que se supone la inexistencia de términos reactivos, fuentes o sumideros.

$$M\dot{C} + N\dot{C} + \dot{f} = 0 \quad (5)$$

en que los coeficientes de las matrices elementales son de la forma:

$$M_{ij} = \int_D v_i v_j dD \quad (6a)$$

$$N_{ij} = \int_D \left\{ D_x^{(e)} \frac{\partial v_i}{\partial x} \frac{\partial v_j}{\partial x} + D_y^{(e)} \frac{\partial v_i}{\partial y} \frac{\partial v_j}{\partial y} + v_x v_i \frac{\partial v_j}{\partial x} + v_y v_i \frac{\partial v_j}{\partial y} \right\} dD \quad (6b)$$

$$f_i = - \int_{\Gamma} D_n^{(e)} v_i \frac{\partial c}{\partial n} d\Gamma \quad (6c)$$

donde $D_x^{(e)}$ y $D_y^{(e)}$ son los coeficientes de dispersión en las direcciones x e y respectivamente, $D_n^{(e)}$ es el mismo coeficiente en la dirección n normal al borde Γ del sistema.

iv) Condiciones iniciales y de borde.

$$h(x,y,0) = H_0(x,y) \quad (7a)$$

$$c(x,y,0) = C_0(x,y) \quad (7b)$$

$$h(x,y,t) = H(x,y,t) \text{ en } \Gamma \quad (7c)$$

$$c(x,y,t) = C(x,y,t) \text{ en } \Gamma \quad (7d)$$

A partir de la formulación teórica general descrita se confeccionó un programa de computación que permite resolver secuencialmente la ecuación del flujo y la de transporte de masas; para acoplar ambos modelos, un subprograma permite obtener las funciones de velocidad dentro de cada elemento a partir de velocidades nodales y de la distribución del potencial en cada punto nodal de la red de elementos finitos. En el diagrama de bloques general de la Figura 1 se esquematiza conceptualmente el procedimiento de resolución.

3. ANALISIS DEL COMPORTAMIENTO DEL MODELO.

Varios autores han enfatizado el problema de oscilaciones e inestabilidad de soluciones que se produce en los modelos numéricos si ciertos parámetros adimensionales toman valores por sobre un límite establecido. Uno de estos parámetros es el número de Peclet que refleja la importancia relativa de los términos convectivos del transporte de masas frente a los dispersivos ($P_e = V \cdot \Delta x / D$, en que Δx refleja el tamaño del elemento en la dirección del flujo); en caso que P_e sea menor o igual a 10.0 la solución resultante del proceso numérico no sufre oscilaciones de mayor importancia. Por otra parte, el número de Courant relaciona el tamaño de la malla con la longitud de los intervalos de tiempo considerados ($Cour = V \cdot \Delta t / \Delta x$), de modo que en caso que sea menor a 1.0 las soluciones se comportan adecuadamente.

Tomando en consideración lo anterior y a fin que las comparaciones de resultados del modelo no se vieran notablemente afectadas por esas limitaciones, en los casos analizados se mantuvo siempre el número de Peclet bajo el límite establecido en 10.0. En cuanto al número de Courant, este se hizo variar en torno a su límite 1.0.

3.1 Esguerrimiento unidireccional con dispersión longitudinal.

El sistema analizado se ha esquematizado en la Figura 2. La solución analítica de ese problema es la siguiente (Ogata, 1970):

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \left[\text{ferc} \left(\frac{x-vt}{2\sqrt{Dt}} \right) + e^{\frac{vx}{D}} \text{ferc} \left(\frac{x+vt}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] \quad (8)$$

donde C_0 es la concentración de entrada inicial, D es el coeficiente de dispersión longitudinal, v la velocidad del flujo y $\text{ferc}(n)$ es la función de error complementario de argumento n . Los valores usados en este caso fueron $C_0 = 10 \text{ mg/l}$, $D = 0.1 \text{ m}^2/\text{min}$ y $V = 0.1 \text{ m/min}$.

Inicialmente se trabajó con elementos cuadriláteros lineales, haciendo variar la longitud del intervalo de tiempo solamente. Los resultados obtenidos pueden verse en el gráfico de la Figura 3 para 10 y 40 minutos luego de iniciado el proceso, y considerando $\Delta t = 1, 5$ y 10 minutos. Puede apreciarse que a medida que el intervalo de tiempo es mayor, y por lo tanto también lo es el número de Courant, las soluciones numéricas se hacen diferentes a la solución analítica desplazándose hacia la izquierda, no obstante presentan ambas cruvas de concentración, formas semejantes; este hecho indicaría que al considerar intervalos de tiempo mayores, sin embargo, el proceso simulado se hace más lento. Es interesante destacar que a pesar de lo anterior, no aparecen problemas de oscilaciones como podría haberse esperado al violar la condición exigida por el número de Courant; esto mismo se comprueba de la verificación efectuada con los resultados, de que la concentración tiende a lo largo del tiempo a alcanzar el valor 10.0 mg/l en todos los puntos del sistema analizado, no saliéndose de este límite.

Con el fin de verificar de qué forma influye el orden de la aproximación numérica, se operó el modelo con elementos cuadráticos y cúbicos en el caso del intervalo de tiempo menor ($\Delta t = 1 \text{ min}$), no encontrándose diferencia significativa alguna con la solución con elementos lineales, lo cual señalaría que el grado de la función de aproximación elegida no produce efecto en la solución numérica. No obstante, en caso de ser necesario aproximar contornos sinuosos o geometrías en general complicadas, será siempre conveniente utilizar elementos con lados curvos y, por lo tanto, funciones de aproximación cuadráticas o cúbicas.

3.2 Esguerrimiento unidireccional con dispersión longitudinal y transversal.

El sistema analizado es el esquematizado en la Figura 4. La solución analítica presentada por Bruch y Street (1967) cuando la concentración inicial en el sistema es nula, es la siguiente:

$$\begin{aligned}
C(x,y,t) = & \frac{\lambda}{n_0} \frac{C_0}{2} \left(\operatorname{ferc} \left(\frac{x-vt}{2\sqrt{D_x t}} \right) + \exp \left(\frac{vx}{D_x} \right) \operatorname{ferc} \left(\frac{x+vt}{2\sqrt{D_x t}} \right) \right) + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(F_n \cos \frac{n\pi y}{n_0} \exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{v}{D_x} - G_n \right) x \right] \operatorname{ferc} \left(\frac{x-G_n D_x t}{2\sqrt{D_x t}} \right) \right) + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(F_n \cos \frac{n\pi y}{n_0} \right) \exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{v}{D_x} + G_n \right) x \right] \operatorname{ferc} \left(\frac{x+G_n D_x t}{2\sqrt{D_x t}} \right) \quad (9)
\end{aligned}$$

donde:

$$F_n = \frac{2C_0}{n\pi} \operatorname{sen} \frac{n\pi\lambda}{n_0} \quad (10a)$$

y

$$G_n = \left[\left(\frac{v}{D_x} \right)^2 + \left(\frac{2n\pi}{n_0} \right)^2 \frac{D_y}{D_x} \right]^{1/2} \quad (10b)$$

en que λ es la porción del contorno en el cual se inyecta el trazador en forma constante, n_0 es el ancho total de la región porosa, D_x y D_y son los coeficientes de dispersión longitudinal y transversal, respectivamente, C_0 es la concentración constante que se inyecta y v es la velocidad promedio de filtración. Los valores de los parámetros usados en este caso fueron: $C_0 = 1.0$ mg/l, $\lambda = 8.4$ cm, $n_0 = 30.8$ cm, $D_x = 0.08043$ cm²/s, $D_y = 0.0695$ cm²/s y $v = 0.0559$ cm/s.

Tal como se señaló en el caso anterior, el modelo con elementos finitos lineales, cuadráticos y cúbicos entregará resultados similares por ello es que en este caso se trabajó únicamente con elementos del primer tipo. Dado que en este caso existe un efecto de dispersión lateral, se eligió los puntos de la Tabla 1 para efectuar las comparaciones con la solución analítica.

Tabla 1
Coordenadas de los puntos de interés

| Punto N° | Abscisa (cm) | Ordenada (cm) |
|----------|--------------|---------------|
| 1 | 20.0 | 0.0 |
| 2 | 60.0 | 14.0 |
| 3 | 180.0 | 22.4 |
| 4 | 100.0 | 30.8 |

En la Figura 5 se ha graficado los resultados obtenidos al considerar intervalos de tiempo $\Delta t = 100$ y 500 segundos, los que han sido comparados con la solución analítica. Puede apreciarse, como en el caso anterior, que la solución numérica que considera el intervalo de tiempo menor se ajusta mucho mejor a la solución analítica (menor número de Courant), al menos cuando la concentración no alcanza valores más altos. Sin embargo, en ambos casos la solución numérica tiende a valores de concentración notablemente mayores a los que se obtienen de la solución analítica; éste sería uno de los efectos que produce la dispersión transversal que afecta al flujo, lo que en este caso particular produce errores de alrededor del 20%. No obstante, tampoco aquí se detecta algún efecto oscilatorio en las soluciones numéricas, lo que estaría garantizado cuando el número de Peclet es inferior a 10.0, como ha sido en todos los casos analizados.

Con el fin de confirmar lo indicado, se operó el modelo haciendo variar los coeficientes de dispersión de modo de violar la condición del número de Peclet. Los resultados obtenidos permitieron verificar que, efectivamente, a medida que el parámetro aumenta las oscilaciones en las soluciones se hacen mayores pudiendo incluso llegar a encontrarse valores de concentración superiores en más del doble que el mayor posible, los que siguiendo en el tiempo pueden llegar a ser negativos. En la Figura 6 se muestra un ejemplo de las oscilaciones encontradas.

3.3 Conclusiones.

De lo anterior puede extraerse como conclusión fundamental que, de la forma como ha sido desarrollado este modelo numérico, solamente es posible encontrar soluciones razonables si el efecto lateral de la dispersión es nulo, o al menos mucho menor que el efecto longitudinal de esa dispersión, siempre que se mantenga tanto el número de Peclet como el número de Courant bajo los valores que limitan un comportamiento inestable de las soluciones.

Dada la importancia que puede llegar a tener el problema de la contaminación de aguas subterráneas en nuestro país, y con el fin de conseguir resultados más satisfactorios para representar adecuadamente el movimiento de un soluto a través de un acuífero, se hace necesario continuar realizando estudios específicos que permitan identificar plenamente los problemas numéricos asociados con la simulación de este proceso, de lo cual este trabajo ha abarcado sólo un aspecto muy parcial. Esta inquietud es general entre los investigadores dedicados al tema.

4. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS.

Bruch, J.C. y Street, R.L. (1967). "Two-Dimensional Dispersion". Journal of the Sanitary Engineering Division, ASCE. Vol. 93, N° SA6, pp. 17-39.

Cabrera, G. (1985). "Un Modelo de Transporte de Masas en Aguas Subterráneas". VII Congreso Nacional de Ingeniería Hidráulica, Sociedad Chilena de Ingeniería Hidráulica, pp. 549-566, Concepción.

Ogata, A. (1970). "Theory of Dispersion in Granular Medium". US Geological Survey Professional Paper 411-I. 34 pág.

Strickler, C. y Cabrera, G. (1987). "Modelo Numérico para el Estudio de la Contaminación de Aguas Subterráneas". Centro de Recursos Hidráulicos, Universidad de Chile, 246 pág.

FIGURA 1 DIAGRAMA DE BLOQUES GENERAL

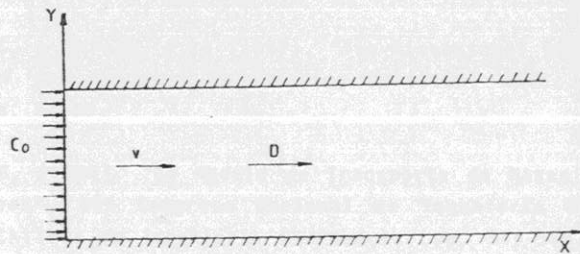
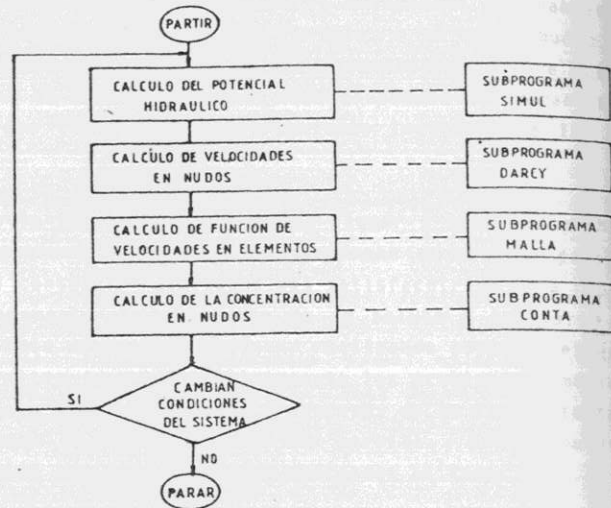


FIGURA 2. FLUJO UNIDIRECCIONAL EN UN MEDIO POROSO CON DISPERSION LONGITUDINAL

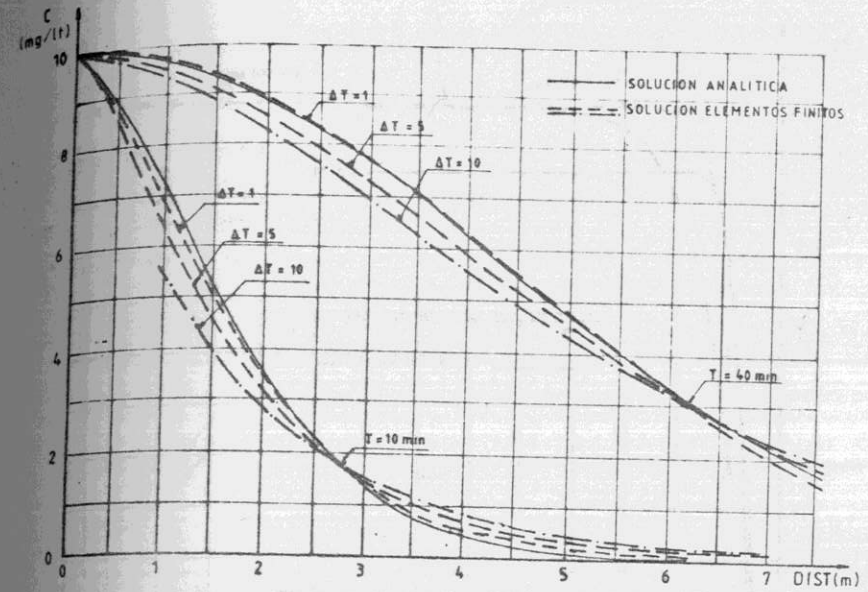


FIGURA 3. FLUJO UNIDIRECCIONAL CON DISPERSION LONGITUDINAL PERFILES DE CONCENTRACION PARA T = 10 Y 40 min

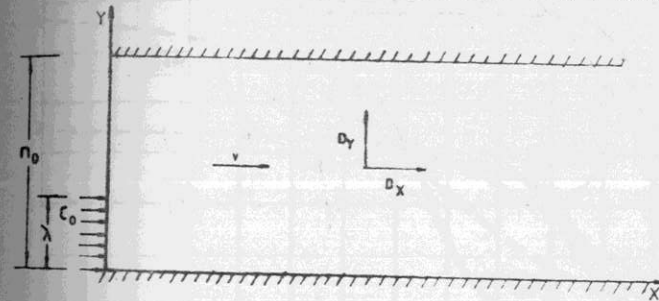


FIGURA 4. FLUJO UNIDIRECCIONAL EN UN MEDIO POROSO CON DISPERSION LONGITUDINAL Y TRANSVERSAL

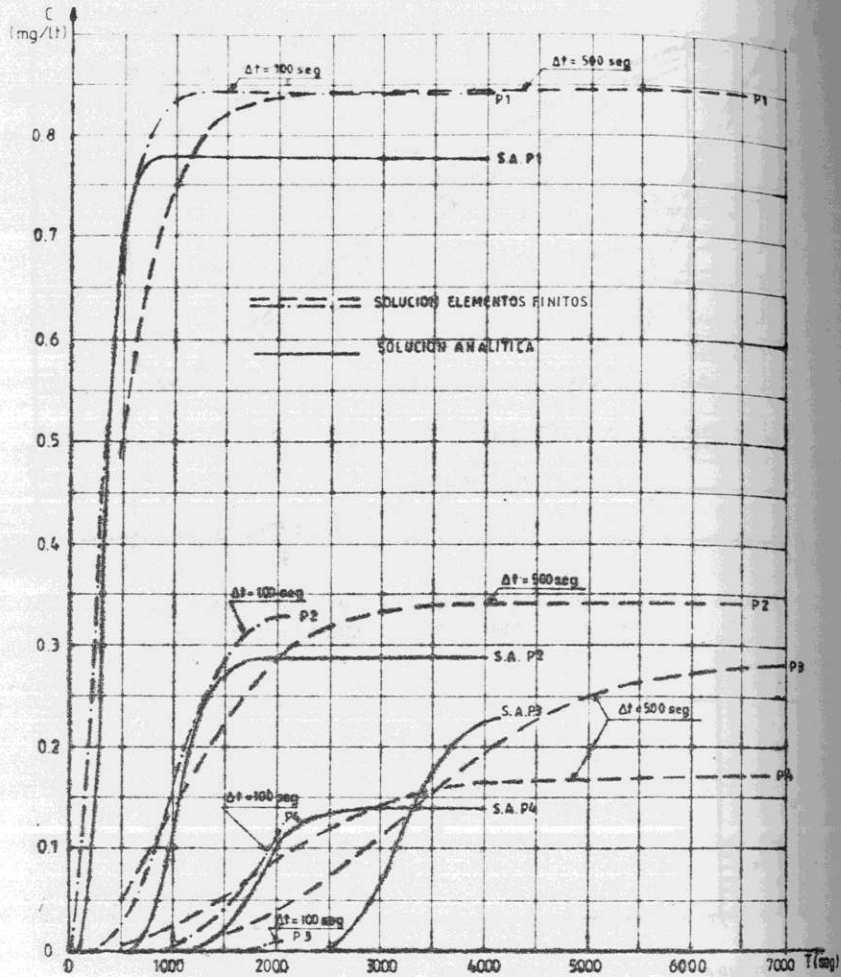


FIGURA 5. FLUJO UNIDIRECCIONAL CON DISPERSION LONGITUDINAL Y TRANSVERSAL - PERFIL DE CONCENTRACION PARA LOS PUNTOS P1, P2, P3 Y P4 CONSIDERANDO $\Delta t = 100$ Y 500 seg.

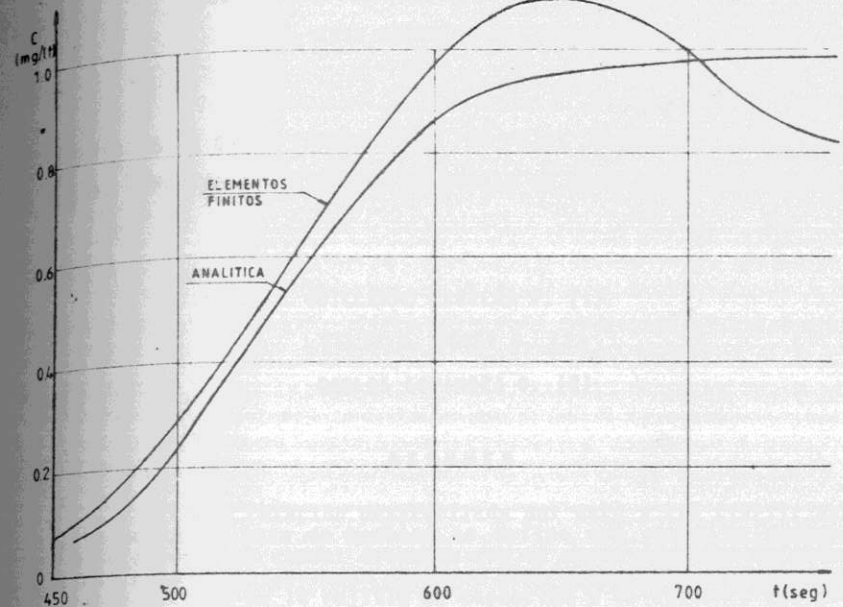


FIGURA 6. CONCENTRACION DE LA SOLUCION PARA PEELET MAYOR DE 10.0