

**Rekenmodel onverzadigde
grondwaterstroming
definitief**

CO710201/66 versie 1

16-11-2001

**Rekenmodel onverzadigde
grondwaterstroming
3D heterogene ondergrond**

CO710201/66

16-11-2001

D:\data\word\co710201.66D.doc

Opgesteld in opdracht van:

DELFT CLUSTER

POSTBUS 69

NL-2600 ABDELFT

AFDELING STRATEGISCH ONDERZOEK

Projectleider : ir. J.M. van Esch

Projectbegeleider: ir. M.A.T. Visschedijk

GeoDelft

Stieltjesweg 2, 2628 CK DELFT

Postbus 69, 2600 AB DELFT

Telefoon (015) 269 35 00

Telefax (015) 261 08 21

Postbank 234342

Bank MeesPierson NV

Rek.nr. 25.92.35.911

rapport nr: CO710201/66/23		datum rapport: 16-11-2001			
titel en subtitel: 3D heterogene ondergrond		behandelende afdeling: Strategisch Onderzoek			
		projectnaam: Rekenmodel onverzadigde grondwaterstroming			
projectleider(s): ir. J.M. van Esch		projectbegeleider(s) ir. M.A.T. Vischedijk			
naam en adres opdrachtgever: Delft Cluster Postbus 69 2600 AB Delft		referentie opdrachtgever: AK005489			
		verzenden in: 5-voud			
		type rapport: definitief			
samenvatting rapport: De stabiliteit van dijken varieert in de tijd, bijvoorbeeld als gevolg van tijdsafhankelijke randcondities. Hierbij valt te denken aan de invloed van een hoogwatergolf op een rivierdijk of het getij op een zeedijk. Als gevolg van de variërende buitenwaterstanden variëren de grondwaterdrukken in het dijklichaam, dit vertaalt zich direct in bijvoorbeeld een stabiliteitsfactor. Momenteel worden dijkconstructies ontworpen bij een maatgevende hoogwatersituatie, een tijdsafhankelijke beschouwing levert in het algemeen een hogere stabiliteitsfactor en dus een economischer ontwerp. Overslaand water bij golfoploop leidt tot infiltratie van water in het binnentalud. Dit vulmechanisme wordt in ontwerpmethoden niet beschreven, er wordt alleen een maximum eis gesteld aan het overslaand debiet. Het faalmechanisme tijdens infiltratie kan, afhankelijk van de opbouw van de ondergrond, een principieel ander karakter vertonen dan dat waarop wordt ontworpen. Een voorgaand rapport co710201/31 beschreef het basisontwerp van een numeriek algoritme waarmee het gedrag van (onverzadigde) grondwaterstroming kan worden gemodelleerd. In dit rapport wordt een driedimensionale uitbreiding gepresenteerd. Gekozen is voor een combinatie van eindige elementen en multigrid. Volgens een adaptive multi grid methode wordt het mesh lokaal verfijnd dit leidt tot een hogere nauwkeurigheid terwijl efficiënt gebruik wordt gemaakt van computergeheugen en rekentijden. De methode leent zich tevens voor het beschrijven van stromingsproblemen door sterk heterogene ondergrond.					
opmerkingen:					
trefwoorden: onverzadigde stromings		verspreiding: Dienst Weg- en Waterbouwkunde, GeoDelft, Plaxis, Delft Cluster, Alterra			
opgeslagen op: onder titel: D:\data\word\co710201.66D.doc				aantal blz.: 28	
versie:	datum:	opgesteld door:	paraaf:	gecontroleerd door:	paraaf:
1	24-11-2001	Esch		Vsd	

INHOUDSOPGAVE

1	Inleiding	1
2	Doelstelling	2
3	Mathematisch model	3
3.1	Balansvergelijkingen	3
3.2	Constitutieve relaties	4
3.3	Beginvoorwaarden	5
3.4	Randvoorwaarden	5
4	Numeriek model	6
4.1	Eindige elementen formulering	6
4.2	Multi grid solver	8
5	Toepassingen	10
6	Conclusies	20
	Notaties	21
	Literatuur	22

1 Inleiding

Grondwaterstromingsprocessen bij geotechnische vraagstukken wordt in bepaalde gevallen onvoldoende beschreven. Dit is het gevolg van een gebrekkige kennis van het materiaalgedrag in de civieltechnische praktijk en het ontbreken van gevalideerde rekenmodellen. Er is bijvoorbeeld onvoldoende inzicht in het sterktegedrag van geotechnische constructies onder tijdsafhankelijke (onverzadigde) stromingscondities. Beïnvloeding van grondeigenschappen door het transport van warmte en opgeloste stoffen door de ondergrond is onduidelijk. Het vervormingsgedrag van de ondergrond bij toepassing van nieuwe technieken in de milieu geotechniek als bioventing, waarbij meerfasestroming een rol speelt, is onbekend. Het project “Ontwerpmodel grondwaterstroming” voorziet in het invullen van deze leemten. Het project wordt uitgevoerd in Delft Cluster verband waarbij wordt samengewerkt door Rijkswaterstaat Dienst Weg en Waterbouwkunde, Plaxis Bv., Alterra en GeoDelft.

In een eerste deelrapport met nummer CO710201/31 is een robust algoritme voor de beschrijving van onverzadigde stroming gepresenteerd. Dit rapport kan als uitbreiding van het eerste rapport worden gelezen. Het onderzoeksgebied in het voorgaande onderdeel werd beperkt tot stuksgewijs homogene en tweedimensionale rekendomeinen. Deze restrictie vergrootte een snelle implementatie in de ingenieurspraktijk na de koppeling van een gebruiksvriendelijke Plaxis user interface. Het ontwerp echter mag een uitbreiding naar sterk heterogene en driedimensionale toepassingen op termijn niet in de weg staan. In dit onderdeel wordt de bruikbaarheid van multi grid rekenmethoden in een eindige elementen context onderzocht. Door middel van upscale technieken kan een expliciete vertaling van het materiaalgedrag tussen de verschillende elementen meshes worden bepaald. Deze toepassingen hebben tot op heden een sterk wetenschappelijk karakter, aangezien zaken als ondergrondskarakterisering; het specificeren van de verdeling van heterogeniteiten in de ondergrond, nog onvoldoende duidelijk zijn. De combinatie van eindige elementen met multi grid maakt adaptive gridding mogelijk. Hierbij wordt het mesh alleen verfijnd daar waar de oplossing van het probleem sterke variaties vertoont. Dit verhoogt de nauwkeurigheid van de oplossing terwijl efficiënt gebruik wordt gemaakt van het computergeheugen en rekentijden beperkt blijven.

In het volgende hoofdstuk wordt de doelstelling kort geformuleerd. In hoofdstuk 3 wordt het mathematisch model gepresenteerd in de vorm van balansvergelijkingen, constitutieve relaties voor het beschrijven van het materiaalgedrag, beginvoorwaarden en randvoorwaarden. De numerieke uitwerking van het probleem wordt gegeven in hoofdstuk 4. Het mathematisch probleem wordt benaderd met de eindige elementen methode waarvan de oplossing met een multigrid techniek wordt bepaald. Het rapport wordt afgesloten met conclusies.

2 Doelstelling

In een eerder onderdeel van het Delft Cluster project “ontwerpmodel grondwaterstroming” is een robuuste beschrijving van het onverzadigd stromingsgedrag middels een eindige elementen model gegeven. Het algoritme maakt onderdeel uit van grondwaterspecial die door GeoDelft en Plaxis wordt vervaardigd. In dit onderdeel wordt onderzoek gedaan naar de bruikbaarheid van de multigrid methode in combinatie met het reeds ontwikkelde algoritme. Hiertoe wordt een multigrid solver geïmplementeerd en met het algoritme worden testberekeningen uitgevoerd. Hierbij wordt met name gekeken naar:

- toepasbaarheid van de methode voor sterk heterogene situaties
- efficiëntie voor het oplossen van driedimensionale problemen

Vervolgens wordt onderzocht of de methode kan worden aangevuld met een flexibele manier van grid verfijnen, om zo rekentijden te reduceren en het geheugengebruik te beperken. Met name voor driedimensionale toepassingen worden de laatste aspecten zeer relevant geacht.

3 Mathematisch model

Het mathematisch model werd afgeleid en gepresenteerd in het rapport CO710201/31 dat in opdracht van de Dienst Weg- en Waterbouwkunde van Rijkswaterstaat, in Delft Cluster verband, tot stand is gekomen. In dit rapport wordt volstaan met de presentatie van de bewegingsvergelijking, de vergelijking voor behoud van massa, constitutieve modellen voor de beschrijving van het materiaalgedrag en begin- en randvoorwaarden volgens het Richards concept.

3.1 Balansvergelijkingen

Richard veronderstelt een oneindige mobiliteit van lucht of een constante druk in de gas fase. Deze druk wordt gelijkgesteld aan de atmosferische druk. De bewegingsvergelijking of gegeneraliseerde wet van Darcy wordt geschreven als

$$q_i = -\frac{kK_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) \quad (3.1)$$

In de vergelijking is het is de index bij de druk in de waterfase weggelaten. De intrinsieke doorlatendheidstensor K_{ij} [m²] wordt geschaald met de relatieve doorlatendheid k [-]. De Darcy snelheid wordt ook wel aangeduid als filtersnelheid, de werkelijke snelheid v [m/s] wordt voor de waterfase gevonden uit:

$$v_i = \frac{q_i}{nS} \quad (3.2)$$

De vergelijking voor continuïteit van massa voor de vloeistof wordt geschreven als:

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho q_i) + Q = \frac{\partial}{\partial t} (nS\rho) \quad (3.3)$$

De bronterm Q [1/s] is hier als macroscopische variabele gedefinieerd.

Substitutie van de wet van Darcy in de continuïteitsvergelijking levert de stromingsvergelijking:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\rho k K_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) \right] + Q = \frac{\partial}{\partial t} (nS\rho) \quad (3.4)$$

Eerst wordt de kettingregel op het rechterlid toegepast, bij een geringe ruimtelijke variatie van dichtheden worden het linkerlid en het rechterlid vervolgens gedeeld door de dichtheid van de waterfase. Het resultaat wordt geschreven als:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{k K_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) \right] + Q = (\alpha + n\beta) S \frac{\partial p}{\partial t} + n \frac{\partial S}{\partial t} \quad (3.5)$$

De eerste term in het rechter lid is in het geval van onverzadigde stroming klein in verhouding tot de tweede term. Elastische berging wordt bepaald door de samendrukbaarheid van de korrelmatrix α [1/Pa] die hier is gelineariseerd volgens:

$$\alpha = \frac{dn}{dp} \quad (3.6)$$

en de samendrukbaarheid van de vloeistof lucht mengsel β [1/Pa]:

$$\beta = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dp} \quad (3.7)$$

Opgemerkt wordt dat hoewel de ruimtelijke variatie van de dichtheid wordt verwaarloosd, de variatie van de dichtheid in de tijd middels de samendrukbaarheidscoëfficiënt wordt beschreven. De specifieke berging is gedefinieerd voor een verzadigd medium, in onverzadigde toestand wordt de term gedomineerd door de verandering van de verzadigingsgraad. De aanvulling van het rechter lid met de specifieke berging maakt de verzadigingsgraad in feite een strikt monotone functie.

Met de druk als primaire variabele wordt de vergelijking geschreven als:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{kK_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) \right] + Q = \left((\alpha + n\beta)S + n \frac{\partial S}{\partial p} \right) \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3.8)$$

Dit resultaat is bekend als de Richards vergelijking.

Voor de stationaire toestand wordt de basisvergelijking geschreven als:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{kK_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) \right] + Q = 0 \quad (3.9)$$

Dit is de stationaire vorm van de Richards vergelijking.

3.2 Constitutieve relaties

De verzadigingsgraad wordt als functionele relaties van de druk worden gedefinieerd, de relatieve doorlatendheid volgt uit een relatie met de verzadigingsgraad.

$$\begin{aligned} S &= S(p) \\ k &= k(S) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Door het gebruik van enkelvoudige functionele verbanden wordt de relatieve doorlatendheid ook wel direct als functie van de druk geschreven:

$$k = k(p) \quad (3.11)$$

Uitdrukkingen voor constitutieve relaties zijn veelal geformuleerd in termen van drukhoogte. Hier wordt één functioneel verband vertaald naar een functioneel verband met de drukhoogte; het Van Genuchten model. De verzadigingsgraad als functie van de capillaire druk p_c [kg/ms²] wordt geschreven als:

$$S = S^r + (1 - S^r) \left[1 + (g_a p^c)^{g_n} \right]^{\left(\frac{1 - g_n}{g_n} \right)} \quad (3.12)$$

De restverzadigingsgraad S^r [-] wordt bepaald door de toestand waarbij de continue waterfase overgaat in een discontinue waterfase. De parameters g_a [-] en g_n [-] worden in het laboratorium bepaald gebruik makend van een fit procedure. De afgeleide van verzadigingsgraad naar druk kan geschreven worden als:

$$\frac{dS}{dp} = \frac{g_a (g_n - 1) (1 - S^r) (g_a p^c)^{(g_a - 1)}}{\left(\frac{2g_n - 1}{g_n} \right) \left[1 + (g_a p^c)^{g_n} \right]} \quad (3.13)$$

Het constitutieve gedrag van de relatieve doorlatendheid als functie van de capillaire druk wordt gevonden met:

$$k = (S^e)^{g_i} \left\{ 1 - \left[1 - S^e \left(\frac{g_n}{g_n - 1} \right) \right] \left(\frac{g_n - 1}{g_n} \right) \right\}^2 \quad (3.14)$$

met de dimensieloze parameter S^e [-]:

$$S^e = \frac{S - S^r}{1 - S^r} \quad (3.15)$$

Deze parameter wordt wel effectieve verzadigingsgraad genoemd.

3.3 Beginvoorwaarden

De stromingsvergelijking wordt aangevuld met initiële condities en randvoorwaarden, waarna de oplossing voor een specifiek probleem kan worden bepaald. Beginvoorwaarden kunnen eenvoudig in termen van druk gedefinieerd worden als:

$$p(x_i, t^0) = \bar{p}^0 \quad \text{in } \Omega \quad (3.16)$$

Met een initieel drukken veld wordt tevens de variatie van watergehaltes (en relatieve doorlatendheden) vastgelegd. Uit de inverse relatie tussen waterspanningen en verzadigingsgraden kan het waterspanningsveld dus ook afgeleid worden uit een initiële verzadiging. Een evenwichtssituatie kan worden bepaald bij gegeven randvoorwaarden. Bij het uitvoeren van berekeningen heeft de laatste procedure de voorkeur.

3.4 Randvoorwaarden

Randvoorwaarden van het eerste type waarbij de druk wordt voorgeschreven, worden genoteerd als:

$$p = \bar{p}(x, t) \quad \text{op } \Gamma_1 \quad (3.17)$$

Neumann type randvoorwaarden hebben geen fysische betekenis, Cauchy randvoorwaarden worden gebruikt om een gegeven vloeistofflux op te leggen:

$$-\frac{kK_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) n_i = \bar{q}(x, t) \quad \text{op } \Gamma_2 \quad (3.18)$$

Sijpelranden worden gedefinieerd met samengestelde randvoorwaarden, deze randvoorwaarden introduceren een geometrische niet-lineariteit:

$$\left\{ \begin{array}{ll} p = 0 & \text{als } -\frac{kK_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) n_i > 0 \\ -\frac{kK_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) n_i = 0 & \text{als } p < 0 \end{array} \right. \quad \text{op } \Gamma_3 \quad (3.19)$$

Een infiltratieproces kan beschreven worden met randvoorwaarden van het eerste type, de druk wordt bijvoorbeeld gelijk aan nul gesteld. Het infiltratiedebiet zal dan afnemen in de tijd en nadert het debiet bij een verzadigde doorlatendheid. Als het debiet aan de rand wordt voorgeschreven moet met dit fenomeen rekening worden gehouden, randvoorwaarden bij dit “ponding” proces worden geschreven als:

$$\left\{ \begin{array}{ll} p = \bar{p}(x, t) & \text{als } \frac{kK_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) n_i < \bar{q}(x, t) \\ \frac{kK_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) n_i = \bar{q}(x, t) & \text{als } p < \bar{p}(x, t) \end{array} \right. \quad \text{op } \Gamma_4 \quad (3.20)$$

Het neerslag debiet q (als positieve bronterm) wordt dus voorgeschreven totdat de druk aan de rand een drempelwaarde overschrijdt. Het debiet kan het gevolg zijn van neerslag, de drempelwaarde in druk wordt dan bepaald door depressies in het terrein. De overlijnde variabelen representeren gegeven waarden. Beide typen variabele randvoorwaarden zijn dus met een enkele conditie te beschrijven.

4 Numeriek model

In dit hoofdstuk wordt het numerieke model gepresenteerd. De eindige elementen discretisatie van het probleem levert een set niet lineaire gewone differentiaal vergelijkingen. Na een Euler backward tijdintegratie wordt een stelsel niet lineaire vergelijkingen gevonden. Dat wordt gelineariseerd met de Picard methode. De oplossing wordt verkregen met een multigrid methode, gebaseerd op een hiërarchie van eindige elementen meshes. In een full approximation storage (FAS) algoritme vindt linearisatie plaats op ieder grid niveau en wordt het niet lineaire stelsel efficiënt opgelost. Vervolgens wordt een criterium voor het verfijnen van het grid op elementniveau gegeven. Door het grid alleen lokaal te verfijnen wordt de oplossing bij een gegeven nauwkeurigheid efficiënt bepaald.

4.1 Eindige elementen formulering

Numerieke uitwerking van de basisvergelijking volgens de methode van Galerkin, waarbij gewichtfuncties gelijk aan de basisfuncties worden gekozen, levert:

$$\int_{\Omega} \left\{ N_a N_b \left((\alpha + n\beta) S + \frac{dnS}{dp} \right) \frac{dp_b}{dt} + \frac{\partial N_a}{\partial x_i} \frac{k}{\mu} K_{ij} \left(\frac{\partial N_b}{\partial x_j} p_b - \rho g_j \right) \right\} d\Omega + \int_{\Gamma} N_a q_i n_i d\Gamma = 0 \quad (4.1)$$

De eindige elementen oplossing wordt gepresenteerd voor een meerdimensionaal probleem:

$$M_{ab} \frac{dp_b}{dt} + S_{ab} p_b = F_b \quad (4.2)$$

Matrices en rechterlid vector worden op elementniveau geformuleerd. De elementen van de massamatrix M_{ab} geheel volgens de geïntegreerde eindige differentie methode is gedefinieerd als:

$$\begin{aligned} M_{ab} = & \int_{\Omega_x} \left(N_a N_b \left((\alpha + n\beta) S + n \frac{S^1 - S^0}{p^1 - p^0} \right) \right) dx + \\ & \int_{\Omega_{\xi}} \left\{ N_a N_b \left((\alpha + n\beta) S^w \rho^w + n \frac{S^1 - S^0}{p^1 - p^0} \right) \right\} j d\xi \approx \\ & \sum_m w_m \left(N_a N_b \left((\alpha + n\beta) S^w \rho^w + n \frac{S^1 - S^0}{p^1 - p^0} \right) \right) j_m \end{aligned} \quad (4.3)$$

De Jacobiaan j_A [m^d] bepaalt het oppervlak van de tweedimensionale subdomain, de factor wordt geëvalueerd in het knooppunt. De elementen van de stijfheidsmatrix S_{ab} :

$$S_{ab} = \int_{\Omega_x} \frac{kK_{ij}}{\mu} \frac{\partial N_a}{\partial x_i} \frac{\partial N_b}{\partial x_j} dx = \int_{\Omega_\xi} \frac{kK_{ij}}{\mu} \frac{\partial N_a}{\partial \xi_k} \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} \frac{\partial N_b}{\partial \xi_l} \frac{\partial \xi_l}{\partial x_j} j d\xi \approx \sum_m w_m \left(\frac{kK_{ij}}{\mu} \frac{\partial N_a}{\partial \xi_k} \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} \frac{\partial N_b}{\partial \xi_l} \frac{\partial \xi_l}{\partial x_j} \right)_m j_m \quad (4.4)$$

De materiaalparameters worden uit de primaire variabelen afgeleid in de integratiepunten na lineaire interpolatie van de primaire variabelen, de materiaalparameters kunnen dus een sterk niet-lineaire gedrag vertonen over het element. De (verzadigde) doorlatendheidstensor wordt constant verondersteld over het element. De elementen van de krachtvector F_b :

$$-F_a = \int_{\Omega_x} \frac{\rho k K_{ij}}{\mu} g_j dx + \int_{\Omega_x^A} N_a \bar{q} dx = \int_{\Omega_\xi} \frac{\rho k K_{ij}}{\mu} g_j j d\xi + \int_{\Omega_\xi^A} N_a \bar{q} j d\xi \approx \sum_m w_m \left(\frac{\rho k K_{ij}}{\mu} g_j \right)_m j_m + \sum_m w_m (N_a \bar{q})_m j_m \quad (4.5)$$

De randintegraal die volgt na toepassing van Green's theorema is via de bronterm in het stelsel vergelijkingen opgenomen. Dirichlet type randvoorwaarden zijn op een niet zo elegante wijze geïmplementeerd; er wordt gebruik gemaakt van de bronterm en een penalty functie die fysische geleidbaarheid symboliseert. De stelsels vergelijkingen voor stroming en transport zijn ontkoppeld, door de tijdsafhankelijke relatie van dichtheid met massafractie opgeloste stof en temperatuur in de stromingsvergelijking in de krachtvector op te nemen. De bronterm bevat een debiet per oppervlak, een puntbron moet dus eerst gedeeld worden door het oppervlak van het sub-domein.

Integratie in tijd wordt vindt plaats met een eindige differentie benadering:

$$M_{ab}^{k+\theta} \frac{p_b^{k+1} - p_b^k}{\Delta t} + \zeta S_{ab}^{k+1} p_b^{k+1} + (1-\zeta) S_{ab}^k p_b^k = \zeta F_a^{k+1} + (1-\zeta) F_a^k \quad (4.6)$$

De weegfactor kan vrij gekozen worden, voor een volledig impliciete of Euler backward benadering ($\zeta = 1$). Het stelsel vergelijkingen met de stijghoogte op de nieuwe tijdstap $k+1$ als onbekende, wordt opgelost volgens 'herhaaldelijke substitutie' of Picard iteratie, volgens:

$$(M_{ab}^{k+1,r} + \Delta t S_{ab}^{k+1,r}) p_b^{k+1,r+1} = M_{ab}^{k+1,r} p_b^k + \Delta t F_a^{k+1,r} \quad (4.7)$$

De materiaalparameters worden consistent bepaald op het nieuwe tijdstip ($k+1$). Bij het opstellen van het stelsel vergelijkingen voor het eerste iteraat worden de materiaalparameters geschat uit de oude tijdstap. Via een projectiemethode volgt de druk op het nieuwe tijdstip $p^{k+1,1}$ [Pa] uit de waarde voor het oude tijdstip (k) en die ervoor ($k-1$) kan het rekenschema worden versneld, implementatie maakt de interpretatie van de resultaten echter minder eenvoudig:

$$p^{k+1,1} = p^k + \frac{t^{k+1} - t^k}{t^k - t^{k-1}} (p^k - p^{k-1}) \quad (4.8)$$

De globale element matrix volgt uit assemblage van matrices op elementniveau, alleen niet nul elementen worden opgeslagen waarbij gebruik gemaakt wordt van een pointer matrix. Het lineaire stelsel vergelijkingen wordt opgelost met de geconjugeerde gradiënten methode. Picard iteratie wordt uitgevoerd tot het maximum aantal iteraties is bereikt op voldaan wordt aan het convergentie criterium, waarvoor de nulde norm van de drukvector wordt berekend:

$$|p^{r+1} - p^r| - \varepsilon_1 |p^1 - p^0| < \varepsilon_0 \quad (4.9)$$

Het verschil tussen twee iteraten bepaalt het convergentiecriterium.

4.2 Multi grid solver

In deze paragraaf wordt het multigrid algoritme kort beschreven. De multigrid methode maakt gebruik van een vaste hiërarchie van grid. De fijnste grid ontstaat uit het grofste na een aantal verfijningsslagen. . Doel van het algoritme is het oplossen van het stelsel vergelijkingen op de fijnste grid in en $O(n)$ bewerkingen. Alleen op de grofste grid wordt het stelsel vergelijkingen exact opgelost bijvoorbeeld met een geconjugeerde gradiënten methode. Gekozen is voor een Full Allocation Storage algoritme omdat met dit algoritme de niet lineaire vergelijkingen binnen een multigrid cyclus in rekening kunnen worden gebracht. Recursieve formulering van het Full Allocation Storage algoritme wordt gegeven door:

$$\begin{aligned}
 u_k^{m+1} &= FAS(k, \gamma, u_k^m, N_k, f_k, v_1, v_2) \\
 \bullet \quad & \text{pre-smoothing} \quad u_k^m = NS(u_k^m, N_k, g_k^m, v_1) \\
 \bullet \quad & \text{course grid correction} \\
 \bullet \quad & \text{downward stroke} \\
 \bullet \quad & \text{restrict approximation} \quad u_{k-1}^m = R_k^{k-1} u_k^m \\
 \bullet \quad & \text{compute new set} \quad N_{k-1}^m(u_{k-1}^m), f_{k-1}^m(u_{k-1}^m) \\
 \bullet \quad & \text{compute truncation error} \quad \tau_{k-1}^m = N_{k-1}^m u_{k-1}^m - R_k^{k-1} N_k^m u_k^m \\
 \bullet \quad & \text{compute right hand side} \quad g_{k-1}^m = f_{k-1}^m + \tau_{k-1}^m \\
 \bullet \quad & \text{solve course grid approximation} \quad N_{k-1}^m w_{k-1}^m = g_{k-1}^m \\
 \bullet \quad & \text{recursive call if } k > 1 \\
 & w_{k-1}^0 = R_k^{k-1} u_k^m \\
 & w_{k-1}^m = FAS(k-1, \gamma, w_{k-1}^0, N_{k-1}, g_{k-1}^m, v_1, v_2) \\
 \bullet \quad & \text{exact solution if } k = 1 \\
 & w_{k-1}^0 = R_k^{k-1} u_k^m \\
 & w_{k-1}^m = NS(w_{k-1}^0, N_{k-1}, g_{k-1}^m, \cdot) \\
 \bullet \quad & \text{upward stroke} \\
 \bullet \quad & \text{compute correction} \quad v_{k-1}^m = w_{k-1}^m - u_{k-1}^m \\
 \bullet \quad & \text{prolongate correction} \quad v_k^m = P_{k-1}^k v_{k-1}^m \\
 \bullet \quad & \text{compute new approximation} \quad u_k^{m+1} = u_k^m + v_k^m \\
 \bullet \quad & \text{compute new set} \quad N_k^{m+1}(u_k^{m+1}), f_k^{m+1}(u_k^{m+1}) \\
 \bullet \quad & \text{recompute} \quad g_k^{m+1} = f_k^{m+1} + \tau_k^m \\
 \bullet \quad & \text{post-smoothing} \quad u_k^{m+1} = NS(u_k^{m+1}, N_k, g_k, v_2)
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

In dit schema wordt het gridniveau aangeduid met sub-script k .

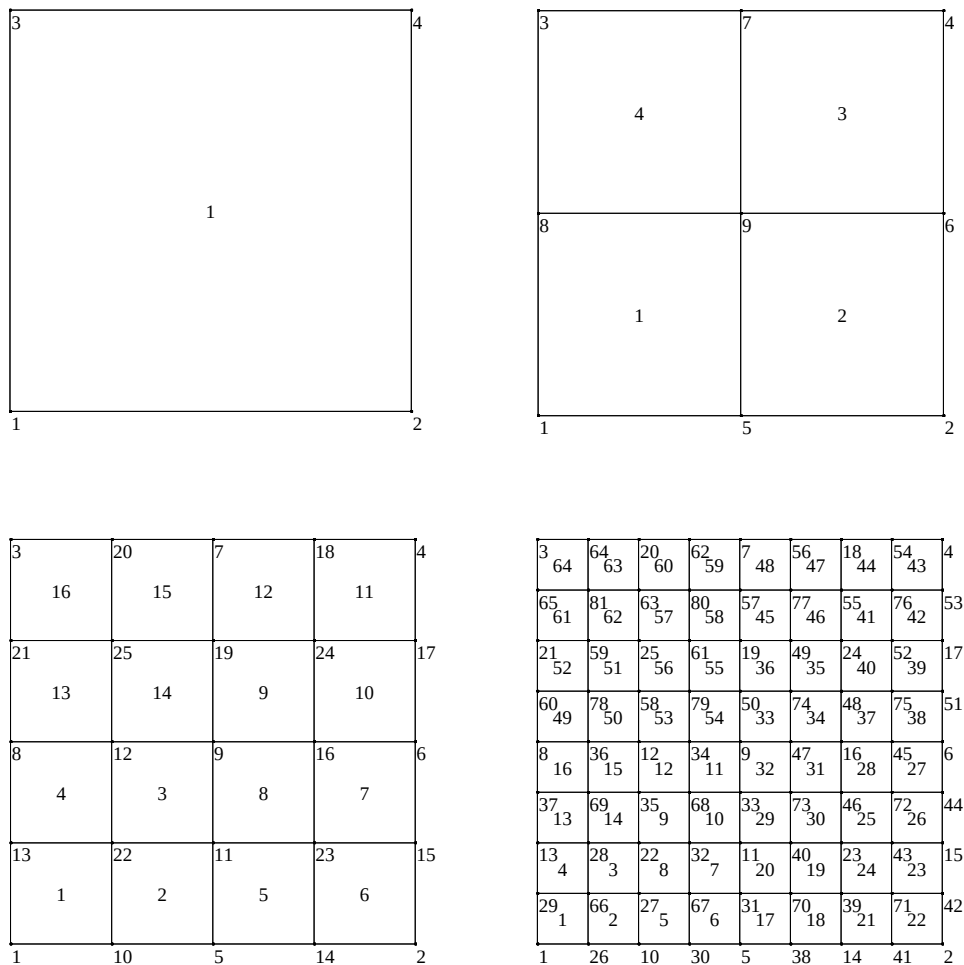
De prolongatie operatie volgt uit de interpolatiefuncties, voor bilineaire elementen kan het resultaat in stelcel formaat geschreven worden als:

$$P_k^{k+1} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 4 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}_{2h}^h \tag{4.11}$$

De representatieve grid lengte wordt aangeduid met h voor het fijne grid en $2h$ voor het grove grid. Als restrictie operatie is de getransponeerde van de prolongatie operatie toegepast. Op deze wijze wordt voldaan aan de Galerkin conditie. De Gauss Seidel smoother wordt geschreven als:

$$u_i^{m+1} = -\frac{1}{L_{ii}} \left(\sum_{j=1}^{i-1} L_{ij} u_j^{m+1} + \sum_{j=i+1}^N L_{ij} u_j^m - f_i \right) \quad (4.12)$$

Het aantal onbekenden is weergegeven met N . De efficiëntie van de methode wordt sterk bepaald door de knoopnummering. Figuur 4.1 toont een efficiënte manier van knoopnummering voor een serie grids.



Figuur 4.1: cefi-knoopnummering

Het convergentie criterium voor het fijnste mesh wordt gelijk aan het criterium voor niet lineare convergentie gekozen:

$$\left| p^{r+1} - p^r \right| - \varepsilon_1 \left| p^1 - p^0 \right| < \varepsilon_0 \quad (4.13)$$

Voor een multigrid methode is het ook mogelijk het grid alleen conditioneel te verfijnen. Voordeel van deze aanpak is een sterke reductie van rekentijden en een beperking van het geheugengebruik. Voor het verfijnen van een element wordt eerst een criterium opgesteld. Eerst wordt het linker lid partieel gedifferentieerd waarbij een convectie diffusie vorm ontstaat:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\rho k K_{ij}}{\mu} \right) \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) + \left(\frac{\rho k K_{ij}}{\mu} \right) \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) \quad (4.14)$$

Voor dit deel van de vergelijking kan een element Peclet getal worden gedefinieerd als:

$$Pe_i = \frac{\Delta l}{k} \cdot \frac{\partial k}{\partial x_i} \quad (4.15)$$

Uit enkele testberekeningen volgt dat verfijnen alleen als het element Peclet getal een gestelde waarde overschrijdt een juiste aanpak levert; het mesh wordt alleen verfijnd ter plaatse van het infiltratiefront. Als gevolg van het verfijnen op een multigrid wijze worden hanging grid points gegenereerd. Dit zijn punten die in een lager grid niveau op een elementrand liggen. Als conditie wordt een waarde voorgeschreven die volgt uit interpolatie binnen het element op het lagere niveau.

In het volgende hoofdstuk worden enige resultaten van berekeningen, uitgevoerd met het bovenstaande algoritme, getoond.

5 Toepassingen

In het rapport co710201/31 zijn een tweetal verificatietesten beschreven waarmee de nauwkeurigheid van het algoritme is getoetst. Vervolgens zijn de verificatietesten gegeneraliseerd tot een viertal testen waarmee verschillende aspecten van numerieke technieken onderling is vergeleken. In dit rapport worden resultaten van driedimensionale berekeningen gepresenteerd. Dit gebeurt alleen voor de vier testberekeningen. De resultaten kunnen direct met eerdere resultaten worden vergeleken. De materiaalbeschrijving is volgens Haverkamp [9]. Voor zand vindt Haverkamp de volgende uitdrukkingen:

$$k = k^s \frac{a}{a + |\psi|^b} \quad (5.1)$$

voor doorlatendheid, het watergehalte wordt beschreven met:

$$\begin{cases} \theta = \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |\psi|^\beta} + \theta_r & \text{als } \psi \leq -1 \text{ cm} \\ \theta = \theta_s & \text{als } \psi > -1 \text{ cm} \end{cases} \quad (5.2)$$

Voor de afgeleide naar de drukhoogte vindt men vervolgens:

$$\begin{cases} \frac{d\theta}{d\psi} = \alpha \beta |\psi|^{\beta-1} \frac{(\theta_s - \theta_r)}{(\alpha + |\psi|^\beta)^2} & \text{als } \psi \leq -1 \text{ cm} \\ \frac{d\theta}{d\psi} = 0 & \text{als } \psi > -1 \text{ cm} \end{cases} \quad (5.3)$$

Voor klei wordt een zelfde relatie voor de doorlatendheid gevonden. Het watergehalte wordt echter geschreven als:

$$\begin{cases} \theta = \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + (\ln|\psi|)^\beta} + \theta_r & \text{als } \psi \leq -1 \text{ cm} \\ \theta = \theta_s & \text{als } \psi > -1 \text{ cm} \end{cases} \quad (5.4)$$

Waarvan de afgeleide eenvoudig kan worden bepaald als:

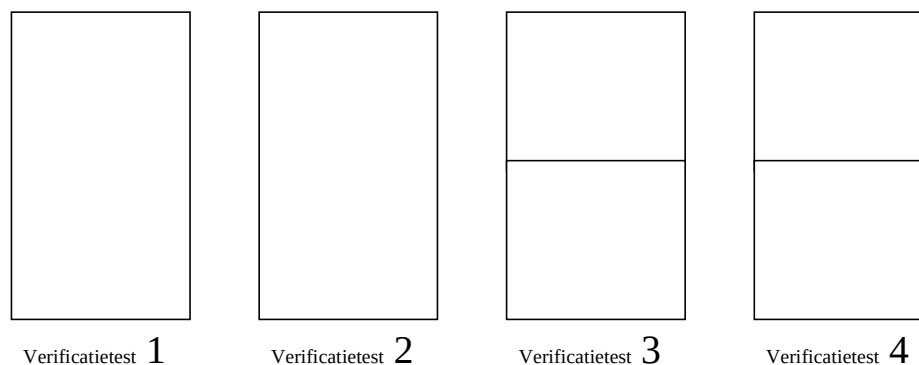
$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{d\theta}{d\psi} = \frac{\alpha\beta(\ln|\psi|)^{\beta-1}}{\psi} \frac{(\theta_s - \theta_r)}{(\alpha + (\ln|\psi|)^\beta)^2} & \text{als } \psi \leq -1\text{cm} \\ \frac{d\theta}{d\psi} = 0 & \text{als } \psi > -1\text{cm} \end{array} \right. \quad (5.5)$$

Voor beide materialen, zand en klei, zijn de parameters in de volgende tabel samengevat:

Tabel 5.1 materiaalparameters

parameter	zand	klei
k_s	34 cm/h ($9.44 \cdot 10^{-5}$ m/s)	0.04428 cm/h ($1.23 \cdot 10^{-7}$ m/s)
a	$1.175 \cdot 10^6$	124.6
b	4.74	1.77
θ_s	0.287	0.495
θ_r	0.075	0.124
α	$1.611 \cdot 10^6$	739
β	3.96	4

Het materiaalgedrag is grafisch weergegeven in de figuren 3.1 tot en met 3.6. De opzet van de testberekeningen wordt getoond in figuur 5.1. De hoogte van de kolom bedraagt één meter, de breedte is 0,4 meter. Volgens verificatietest 1 is de kolom opgebouwd uit zand, verificatietest 2 gaat uit van een homogene kleikolom. Heterogene gevallen worden gedefinieerd voor verificatietest 3 en 4, de eerste configuratie wordt gevormd door klei op zand, in het tweede geval is dit zand op klei.



Figuur 5.1: opzet verificatietest

Als start voor de berekeningen wordt een constante druk gekozen. Met een constant volumiek gewicht van de vloeistof van 10.000 N/m^3 worden de initiële condities worden geschreven als:

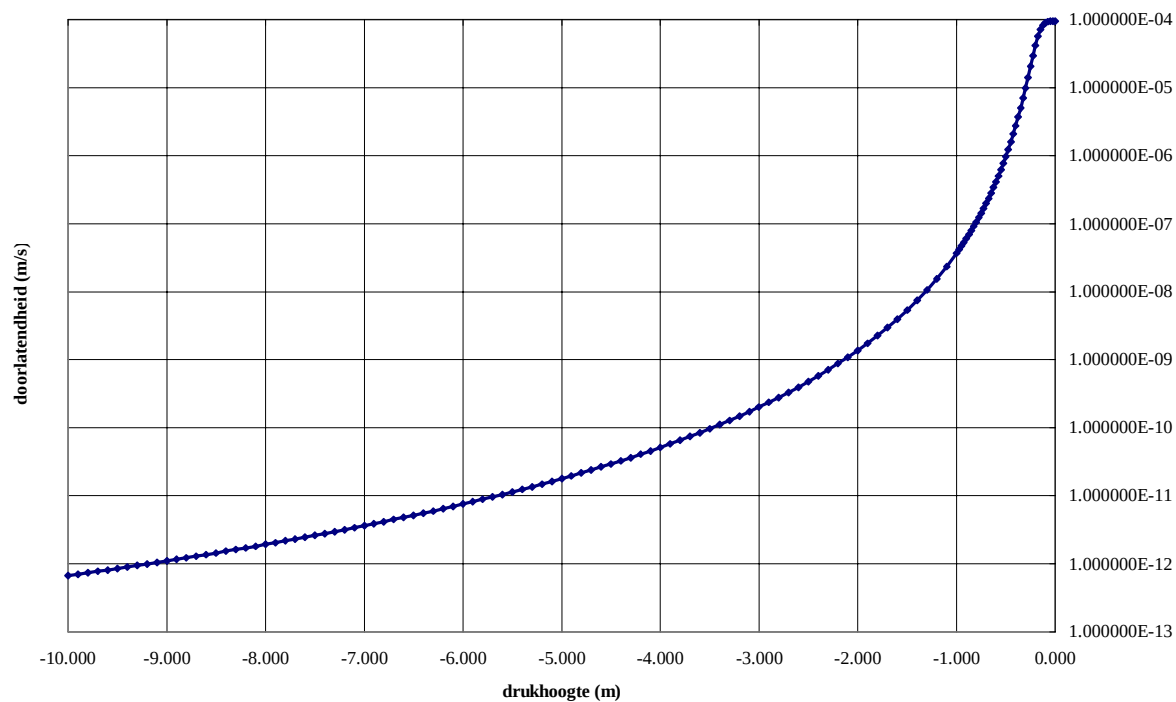
$$p(x, z, 0) = -10^4 \text{ N/m}^2 \quad (5.6)$$

Randvoorwaarden worden gedefinieerd als:

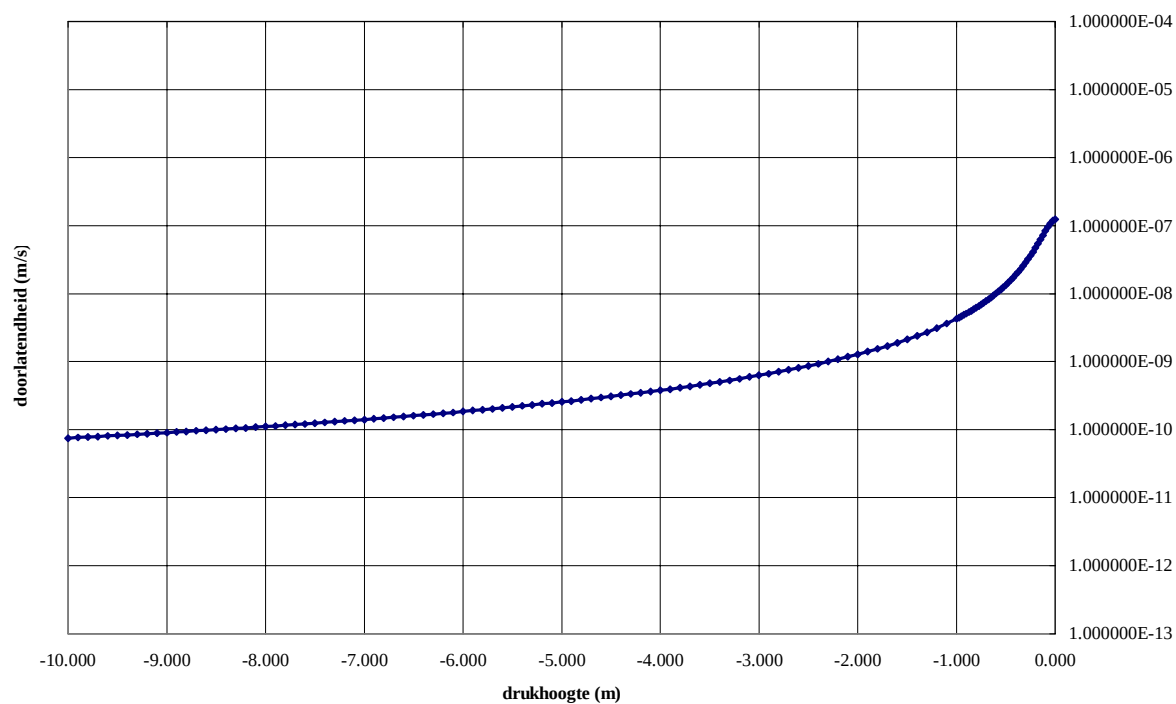
$$\begin{aligned} p(x, 1, t) &= 0 \text{ N/m}^2 \\ p(x, 0, t) &= -10^4 \text{ N/m}^2 \end{aligned} \quad (5.7)$$

Als randvoorwaarden is gekozen voor constante drukranden om een stationaire beschouwing onder onverzadigde condities mogelijk te maken. De keuze van de initiële condities geeft aanleiding tot een

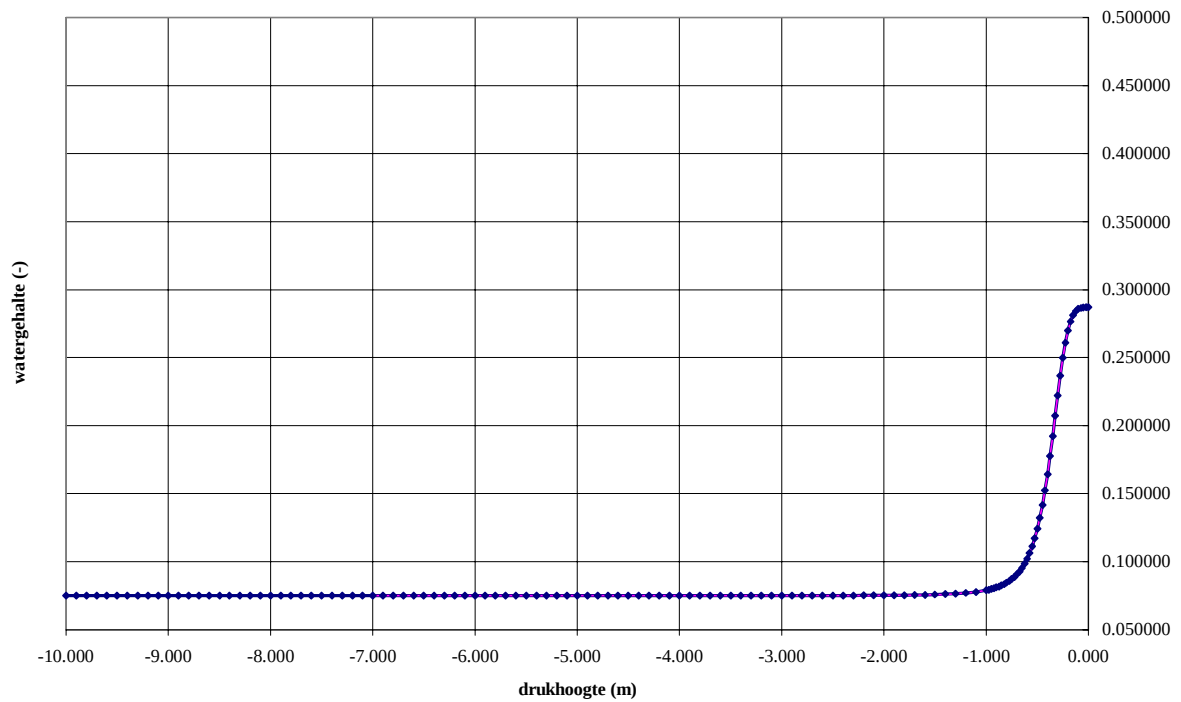
neerwaarts gerichte stroming.



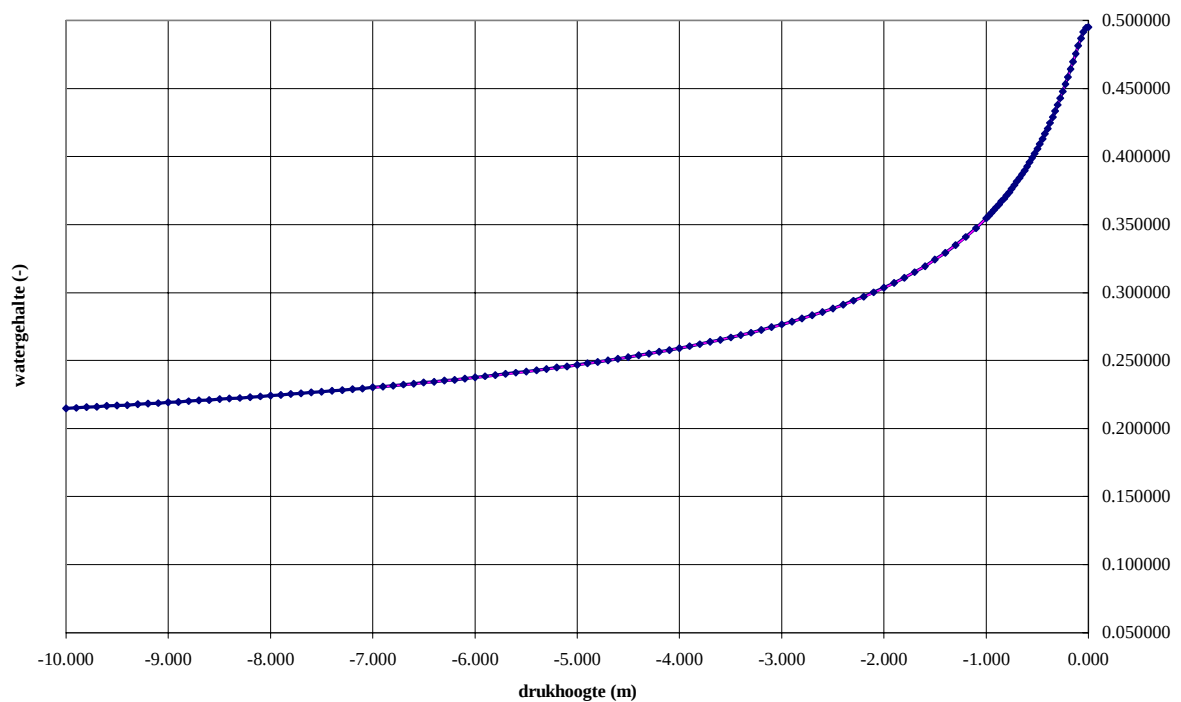
Figuur 5.2: doorlatendheid zand



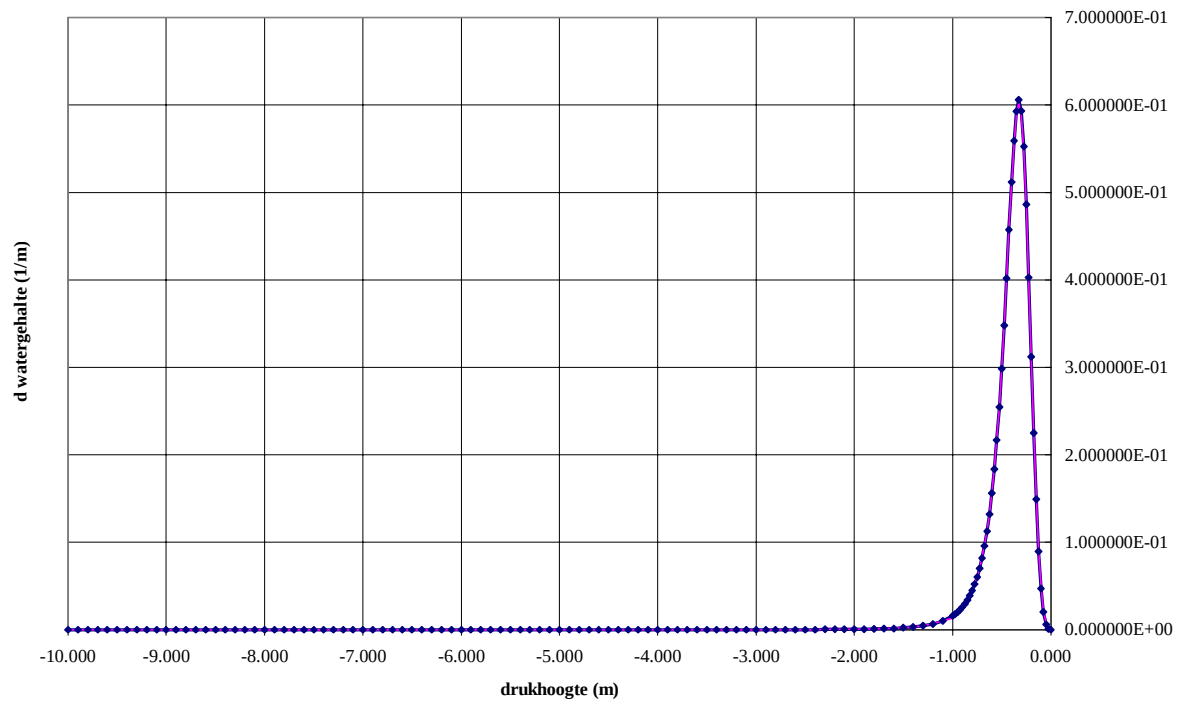
Figuur 5.3: doorlatendheid klei



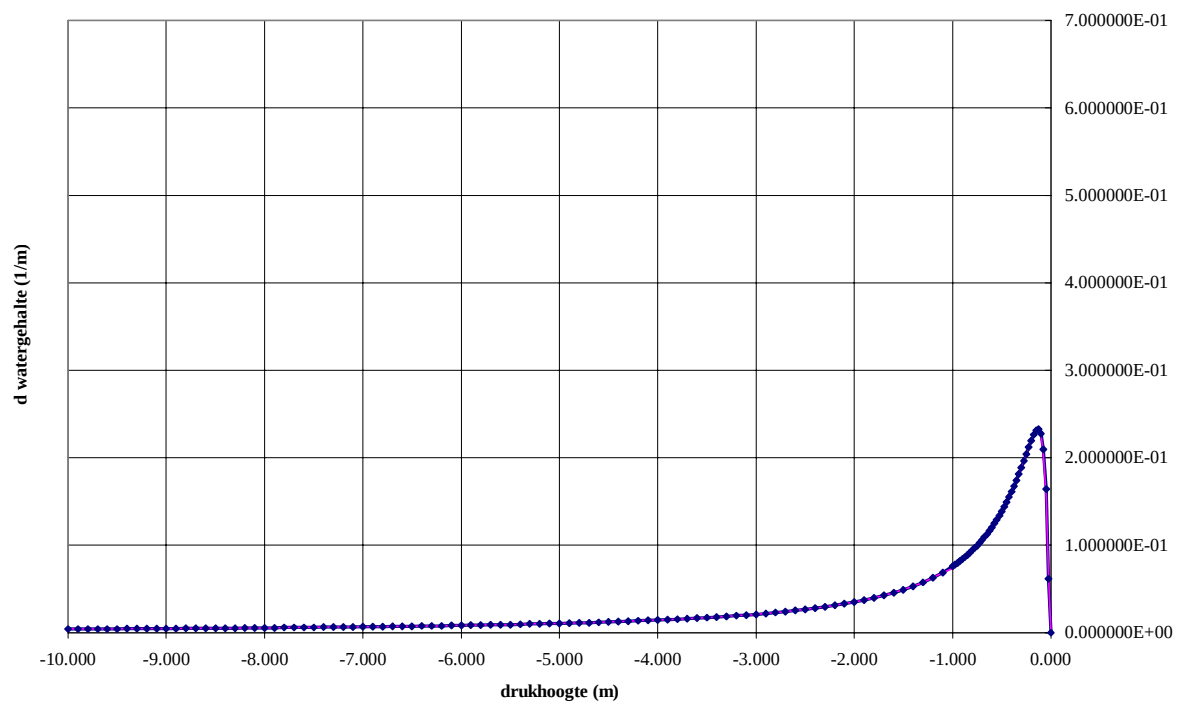
Figuur 5.4: watergehalte zand



Figuur 5.5: watergehalte klei

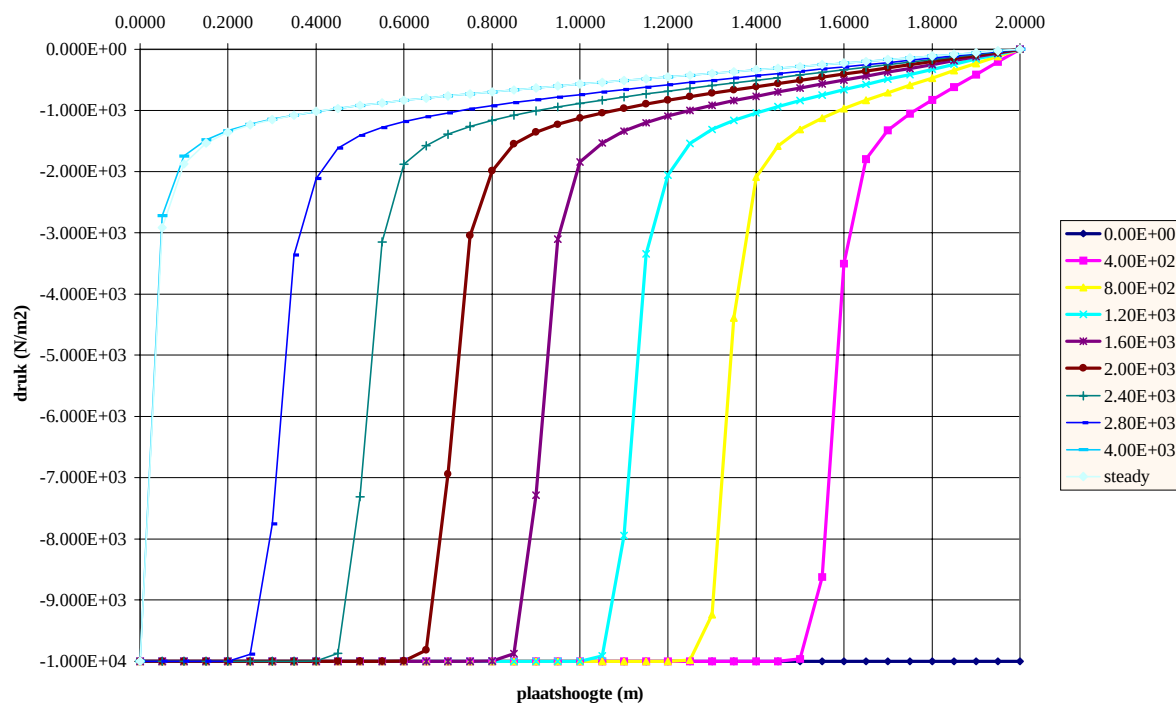


Figuur 5.6: watergehalte afgeleide zand

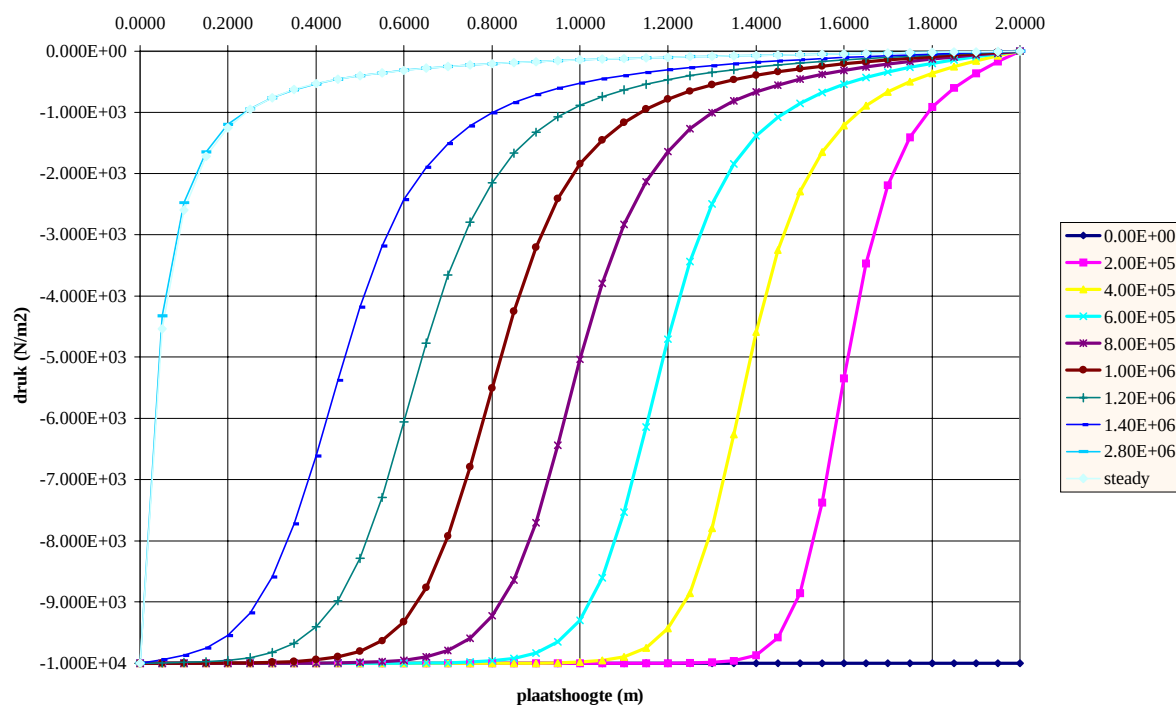


Figuur 5.7: watergehalte afgeleide klei

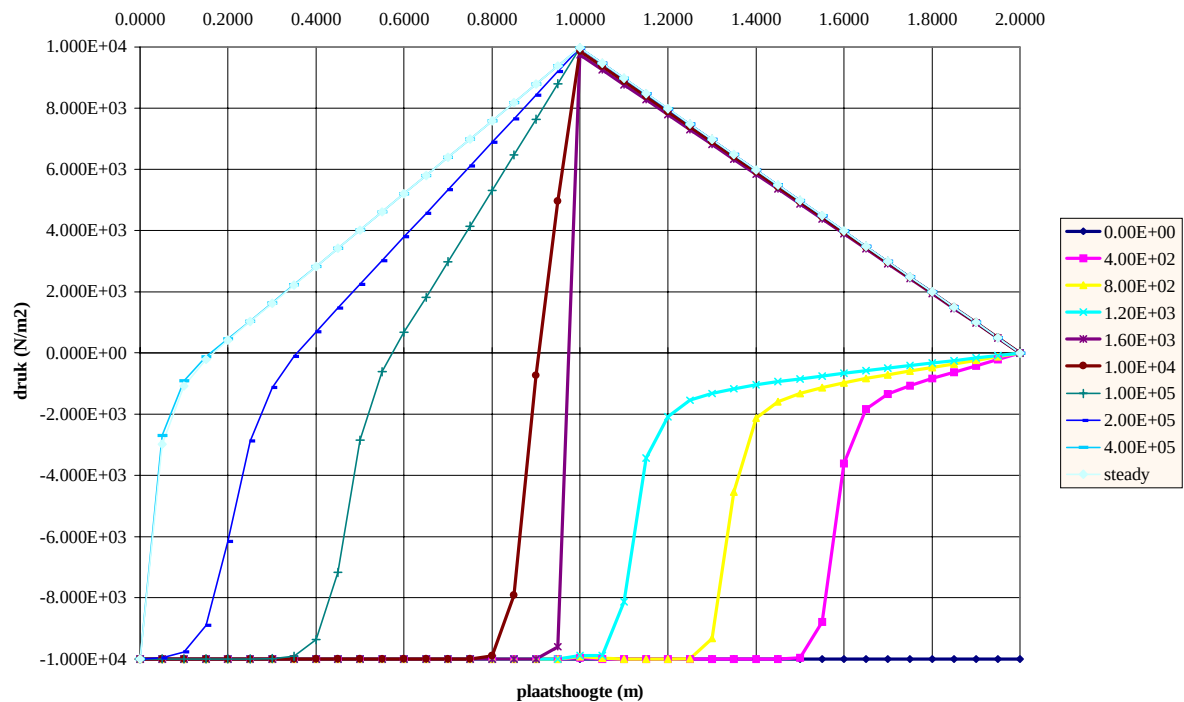
De resultaten van de vier verificatietesten zijn in de onderstaande figuren afgebeeld, de berekeningen zijn uitgevoerd voor lineaire driehoeken bij een mesh grootte van 5 cm. Voor een mesh met elementen van 20 cm, 10 cm en 5 cm is afgebeeld in de bijlage voor lineaire als kwadratische elementen.



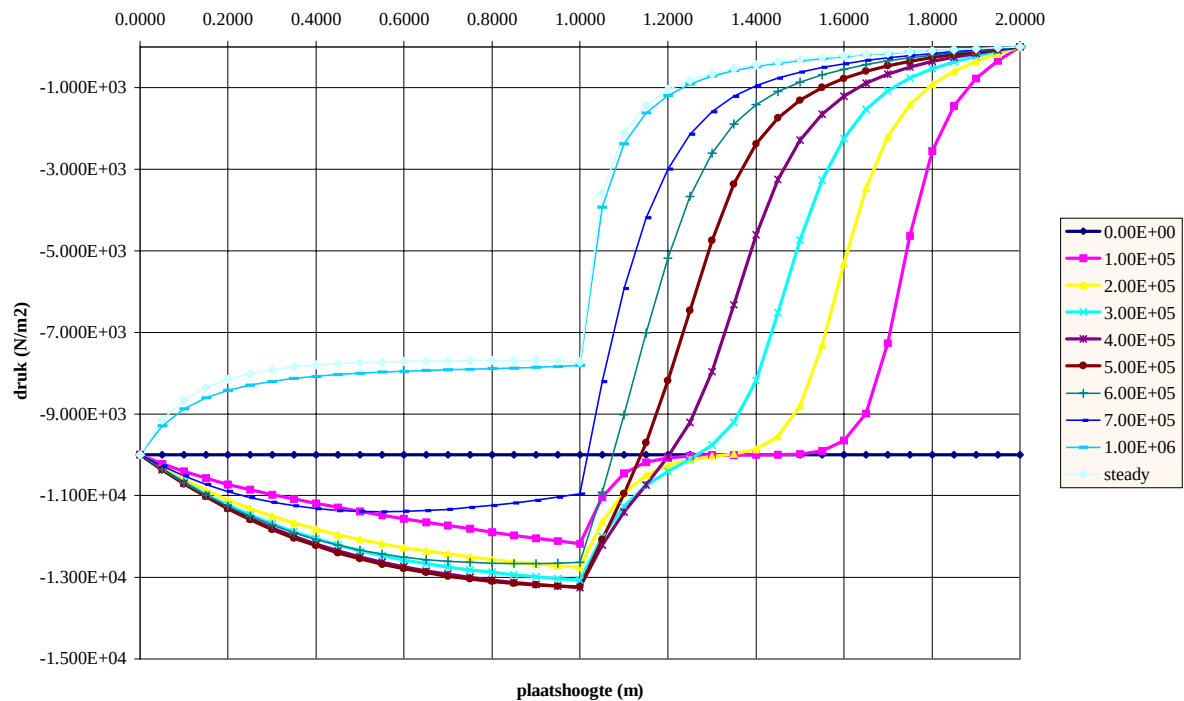
Figuur 5.8: simulatietest 1



Figuur 5.9: simulatietest 2



Figuur 5.3: simulatietest 3

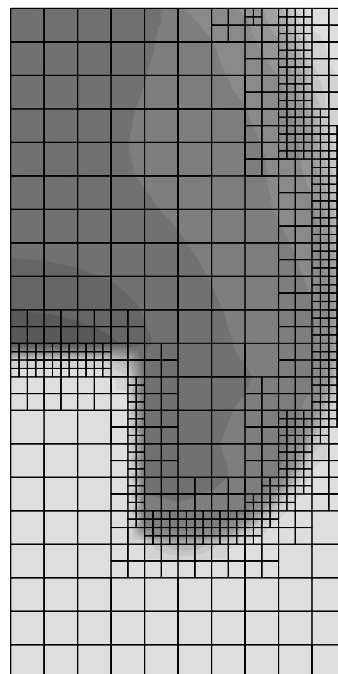
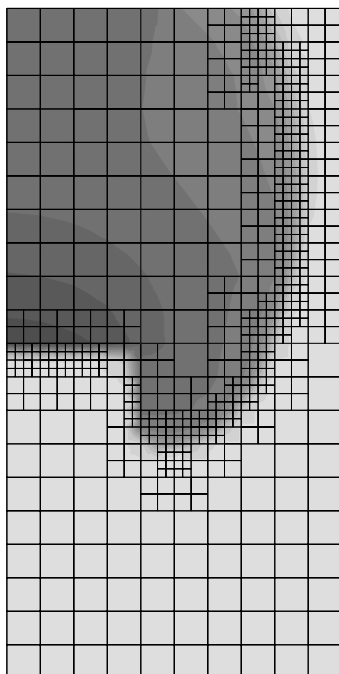
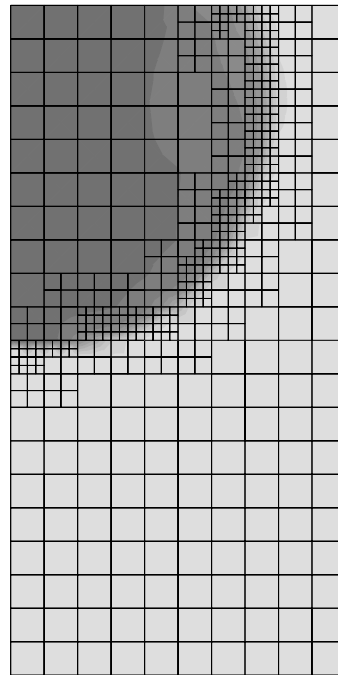
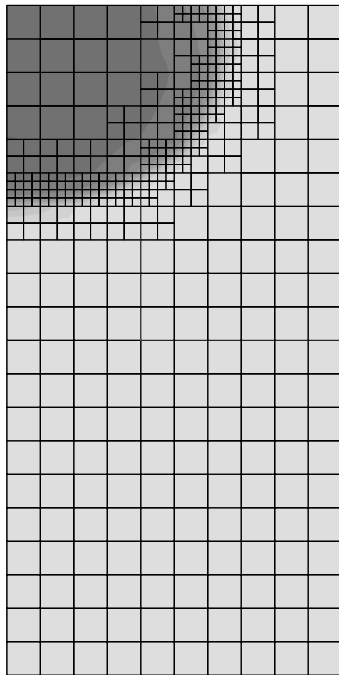


Figuur 5.4: simulatietest 4

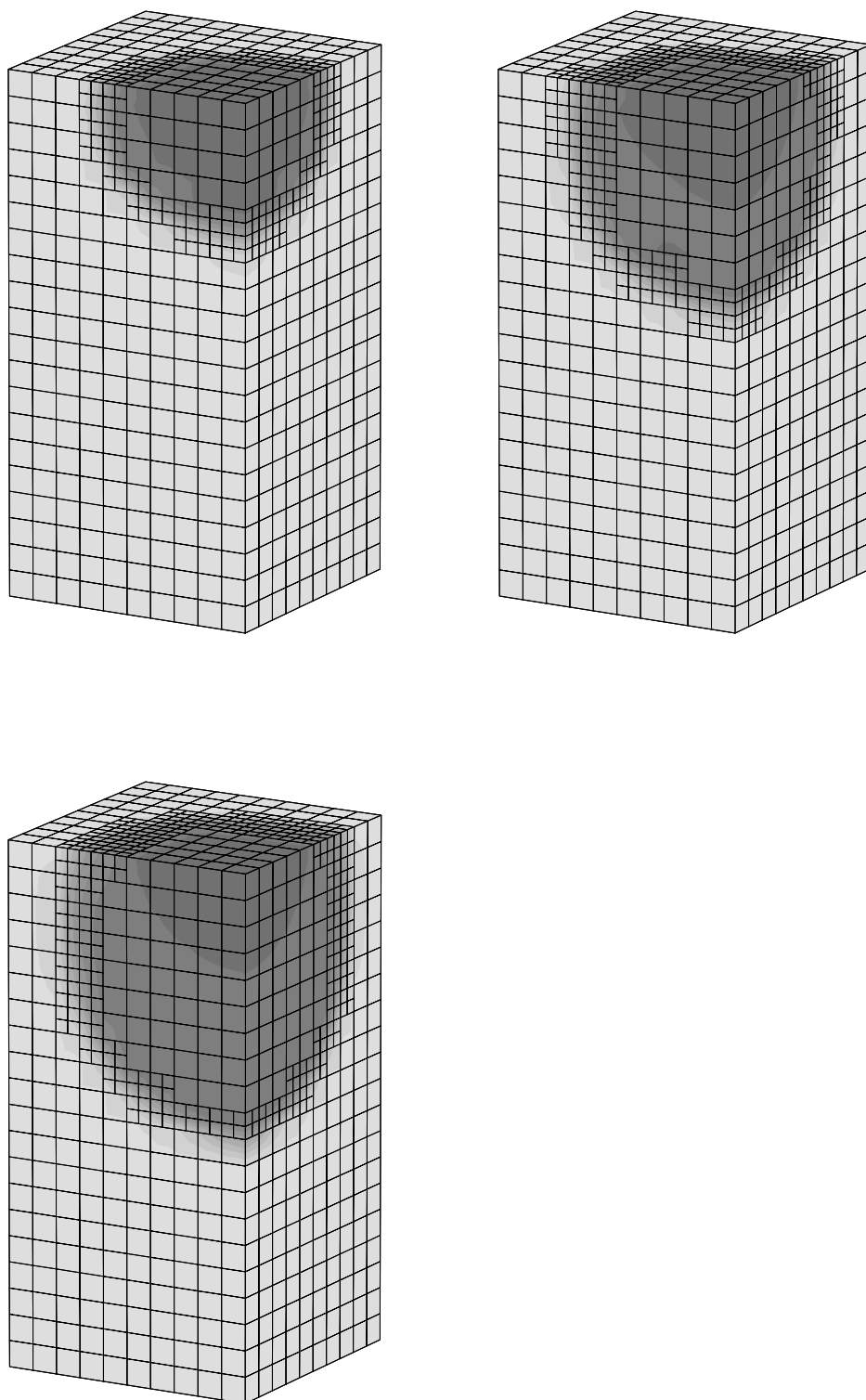
Testberekening 1 beschrijft infiltratie door een homogene zand kolom Opvallend is het steile helling van het front (een grotere schijnbare convectieve component). Testberekening 2 beschrijft infiltratie door een homogene klei kolom. Het materiaalgedrag van klei leidt tot minder steile vochtfronten

(meer diffusie). Het probleem laat zich hierdoor beter beschrijven met een numeriek model. Testberekening 3; infiltratie door een heterogene kolom bestaande uit zand met een klei toplaag. Initieel wordt een inspeleffect waargenomen. Continuïteit van druk en flux op de grenslaag wordt gevonden bij een lagere druk dan de initiële druk, en er vindt aanvulling van het kleimateriaal plaats vanuit de zandonderlaag. Bij het naderen van de laagscheiding door het vochtfront treedt vrijwel direct een evenwichtsdrukverloop in het zand op; de tijdschaal van het infiltratieproces wordt bepaald door het slecht doorlatende topmateriaal; de kleilaag. Mede door de geringe hoogte van de zandlaag kan gesteld worden dat de toplaag het infiltratieproces conditioneert. Testberekening 4 beschouwt het infiltratiegedrag door een kolom met een onderlaag van klei en een toplaag van zand. Een inspeleffect wordt echter niet waargenomen aangezien de tijdschaal van dit effect wordt bepaald door de tijdschaal van het slecht doorlatende materiaal. Infiltratie vindt plaats op de tijdschaal van het goed doorlatende materiaal. Na het vochtfront de laagscheiding heeft bereikt treedt een drukopbouw op boven het slecht doorlatende materiaal, die een hydrostatische druk nadert. Het verschil tussen hydrostatische druk en de berekende waarden bepaalt de stromingsflux. Hier treedt een schijnwaterspiegel op. De resultaten van de berekeningen uitgevoerd met een enkel grid in een driedimensionaal rekendomein zijn gelijk aan die voor een tweedimensionaal geval.

Figuur 5.5 toont de waterspanningsverdeling voor testberekening 3 op een aantal tijdstappen bij gebruik van adaptive gridding. In figuur 5.6 zijn de resultaten afgebeeld voor een geheel driedimensionale configuratie. Het rekendomein van testberekening 3 is uitgebreid door de kolom te omsluiten met zand. In beide gevallen worden nauwkeurige resultaten gevonden.



Figuur 5.5: simulatietest 5, zand boven klei omgeven met zand 2D



Figuur 5.6: simulatietest 5, zand boven klei omgeven met zand 3D

6 Conclusies

De toegepaste iteratieve solver; de gepreconditioneerde bi-geconjugeerde gradiënten methode, voor het oplossen van lineaire stelsels vergelijkingen levert goede resultaten. Een voordeel van het gebruik van iteratieve solvers ligt in het feit dat het stelsel vergelijkingen niet gereduceerd wordt voor essentiële randvoorwaarden. Dit is voordelig in situaties van gecombineerde randvoorwaarden zoals sijpelranden en ponding condities. Een iteratieve solver is ook in staat het geheugengebruik sterk te beperken in geval van ijle stelsels vergelijkingen. Deze eigenschap is zeker van belang in geval van driedimensionale situaties.

Voor sterk heterogene problemen heeft het de voorkeur om de geconjugeerde gradientmethode te preconditioneren met een multi grid methode. Het is echter ook mogelijk het Full Allocation Storage (FAS) algoritme te gebruiken waarbij alleen op het grofste grid gebruik gemaakt wordt van de gepreconditioneerde bi-geconjugeerde gradiënten solver. Op fijnere grids wordt de fout met enkele Gauss Seidel sweeps vereffend. Het is dan wel van belang de knopen op een efficiënte manier te nummeren.

Toepassen van het Full Allocation Storage algoritme leidt eenvoudig tot de mogelijkheid het grid alleen te verfijnen daar waar het gewenst is voor het behalen van voldoende nauwkeurigheid. In dit rapport is een criterium opgesteld op basis van een element Peclet getal, dat wordt gevonden nadat de Richards vergelijking in een convectie diffusie vorm wordt gebracht. Reken resultaten tonen aan dat het mesh bij het oplossen van een infiltratieprobleem, op basis van dit criterium, alleen in het front wordt verfijnd. Op deze manier wordt efficiënt gebruik gemaakt van computergeheugen en blijven rekentijden beperkt.

Notaties

C	Vocht bergingscapaciteit	1/m
Cr	Courant getal	-
d	dimensie	-
$\{F_a\}$	krachtvector	m^d
g	gravitatieversnelling	m/s^2
$g_a g_n$	Van Genuchten parameters	-
j	Jacobiaan	m^d
$[J_{ij}]$	matrix van Jacobi	m
$[k_{ij}]$	intrinsieke doorlatendheid	m^2
$[K_{ij}]$	doorlatendheid	m/s
n	porositeit	-
$\{n_i\}$	normaalvector	m
$\{N_a\}$	interpolatie vector	-
$[M_{ab}]$	massamatrix	m^{d-1}
p	druk	kg/ms^2
Pe	Peclet getal	-
$\{q_i\}$	specifiek debiet	m/s
Q	bronterm	1/s
S	verzadigingsgraad	-
S^e	effectieve verzadigingsgraad	-
S^r	rest verzadigingsgraad	-
S^s	specifieke berging	1/s
$[S_{ab}]$	stijfheidsmatrix	m^{d-1}/s
t	tijd	s
$\{v_i\}$	snelheid	m/s
V	volume	m^3
$\{x_i\}$	plaats	m
z	plaatshoogte	m
α	samendrukbaarheid korrels	ms^2/kg
β	samendrukbaarheid water	ms^2/kg
δ_{ij}	Kronecker delta	-
Γ	stromingsrand	m^{d-1}
μ	dynamische viscositeit	kg/ms
θ	volumiek vocht gehalte	-
ρ	dichtheid	kg/m^3
ς	weegfactor	-
$\{\xi_i\}$	lokale plaatsvector	-
Ω	Stromingsdomein	m^d

Literatuur

[Bathe 1996]

K.J. Bathe, Finite element procedures, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1996.

[Bear 1988]

J. Bear, Dynamics of fluids in porous media, Dover Publications, New York, 1988.

[Case 1994]

C.M. Case, Physical principles of flow in unsaturated porous media, Oxford university press, New York, 1994.

[Freeze 1979]

R.A. Freeze and J.A. Cherry, Groundwater, Prentice Hall, Englewoods Cliffs, New Jersey, 1979.

[GD-CO710201/31 2001]

GeoDelft CO710201/31, Rekenmodel onverzadigde grondwaterstroming, Delft, The Netherlands, 1994.

[Guymon 1994]

G.L. Guymon, Unsaturated zone hydrology, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 19..

[Haverkamp 1977]

R.Haverkamp ea., Accomparision of numerical simulation models for one dimensional infiltration, Soil science soc. am., 1977.

[Hirsch 1988]

C. Hirsch, Numerical computation of internal and external flows, Volume 1 and 2, John Wiley & Sons, Chichester, 1988.

[Huyakorn ea. 1983]

P.S. Huyakorn and G.P. Pinder, Computational methods in subsurface flow, Academic Press, San Diego, 1983.

[Philip 1969]

J.R. Philip, Theory of infiltration, Advances in hydrosience, 1969.

[Press ea. 1992]

W.H. Press ea., Numerical Recipes in C, Cambridge University Press, New York, 1992.

[Ségon 1993]

G Ségon, Classic groundwater simulations, proving and improving numerical models, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1993.

[Stephens 1996]

D.B. Stephens, Vadose zone hydrology, Lewis publishers, Boco Raton, 1996.

[Van Kan ea. 1993]

J. van Kan en A. Segal, Numerieke methoden voor partiële differentiaalvergelijkingen, Delftse uitgevers maatschappij, 1993.

[Zaradny 1993]

H. Zaradny, Groundwater flow in saturated and unsaturated soil, A.A. Balkema, Rotterdam, 1993.

[Zienkiewicz 1989]

O.C. Zienkiewicz and R.L. Taylor, The finite element method Volume 1 and 2, McGraw-Hill book company, Maidenhead, Berkshire, England, 1989.

