## Bruggeman's solution 223\_02

#### 31 december 2024

#### Intro, aanleiding 1

Gezocht is het verloop van de onttrekking rond een cikelvormige (bouw)put in een oneindig uitgestrekt pakket bij vaste verlaging op de rand r=R. Dit probleem is hier gereduceerd tot een onttrekking op een cilinder met radius R als gevolg van een plotselinge verandering van de stijghoogte  $h_R$  op t=0. De oplossing voor dit probleem wordt gegeven door Bruggeman (1999) als oplosing 223 02, p163:

$$\phi(r,t) = h \left\{ 1 - \frac{2}{\pi} \int_{u=0}^{\infty} \frac{1}{u} h(u,r) \exp\left(-\frac{u^2 t}{\beta^2 R^2}\right) du \right\}$$

met

$$h(u, r/R) = \frac{J_0(u)Y_0(\frac{r}{R}u) - Y_0(u)J_0(\frac{r}{R}u)}{J_0^2(u) + Y_0^2(u)}$$

en  $Y_0$  en  $J_0$  de bekende oscilerende Besselfuncties.

Het debiet Q(t,r) wordt op de standaard wijze verkregen als

$$Q\left(t,r\right)=-2\pi rT\frac{\partial\phi\left(t,r\right)}{\partial r}$$

met T [L^2/T] het doorlaatvermogen.

De r komt alleen voor in h(u, r/R). Differentiatie naar r daarvan levert

$$\frac{\partial h(u, r/R)}{\partial r} = \frac{u}{R} \frac{Y_0(u) J_1(\frac{r}{R}u) - J_0(u) Y_1(\frac{r}{R}u)}{J_0^2(u) + Y_0^2(u)}$$

waarin met  $\frac{dJ_{0\left(x\right)}}{dx}=-J_{1}\left(x\right)$  en  $\frac{dY_{0}\left(x\right)}{dx}=-Y_{1}\left(x\right)$  Het debiet kan dan als volgt worden bepaald

$$\begin{split} Q\left(t,r\right) &= -2\pi r T \frac{\partial \phi(t,r)}{\partial r} \\ &= -(2\pi r T)(-h\frac{2}{\pi}) \int_{u=0}^{\infty} \frac{1}{u} \frac{\partial h(u,r/R)}{\partial r} \exp\left(-\frac{u^2 t}{\beta^2 R^2}\right) du \\ &= h \, 4r T \int_{u=0}^{\infty} \frac{1}{u} \frac{\partial h(u,r/R)}{\partial r} \exp\left(-\frac{u^2 t}{\beta^2 R^2}\right) du \\ &= h \, 4r T \int_{u=0}^{\infty} \frac{1}{u} \frac{u}{R} \frac{Y_0(u) J_1(\frac{r}{R}u) - J_0(u) Y_1(\frac{r}{R}u)}{J_0^2(u) + Y_0^2(u)} \exp\left(-\frac{u^2 t}{\beta^2 R^2}\right) du \\ &= 4T h \frac{r}{R} \int_{u=0}^{\infty} \frac{Y_0(u) J_1(\frac{r}{R}u) - J_0(u) Y_1(\frac{r}{R}u)}{J_0^2(u) + Y_0^2(u)} \exp\left(-\frac{u^2 t}{\beta^2 R^2}\right) du \\ &= 4T h \frac{r}{R} \int_{z=-\infty}^{+\infty} u \frac{Y_0(u) J_1(\frac{r}{R}u) - J_0(u) Y_1(\frac{r}{R}u)}{J_0^2(u) + Y_0^2(u)} \exp\left(-\frac{u^2 t}{\beta^2 R^2}\right) dz, \ u = e^z \end{split}$$

In de laatste regel wordt de integratie variabele vervangen om te vermijden over een logaritmische as te moeten integreren, dus door te schrijvend l<br/>n $u=dz=\frac{du}{u}$ zodat  $du=u\,dz$ , vandaar de uvoor de uitdrukking met de Bessel<br/>functies in de laatse vergelijking. Uiteraard geldt in de laatste regel<br/>  $u=\exp{(z)}$ .

In de figuren1 en 2 is het argument onder de integraal uitzetten tegen  $z = \ln u$ . In figuur 1 is dit gedaan voor de uitdrukking voor  $\phi$  en voor het argument onder de integraal en in figuur 2 voor de uittdrukking van Q. Uiteraard is het argument voor  $\phi$  identiek aan 0 voor r = R. Voor andere r > R onstaan oscillaties. Ook laten de grafieken zien dat het argument onder de integraal in de uittdrukking van  $\phi$  maar heel langzaam daalt voor kleine  $z = \ln u$ . Het plaatje gaat tot 8 logcycli links van z = 0, u = 1. Dat is nogal wat. Het argument onder de integraal van de uitdrukking van Q heeft blijkbaar geen oscillaties voor r = R, maar wel voor r > R. Hier lijkt integratie tussen -8 < z < 4 voldoende om de integraal nauwkeurig uit te rekenen. Dit blijkt echter een illusie. Het argument voor kleine z lijkt nul, maar blijkt dat niet te zijn. Om een goede waarde van de integraal te krijgen moeten we bijvoorbeeld integreen over -1000 < z < 4, dus over ruim 104 logcycli wat u betreft. Het verrraderlijke van deze integraal zit hem dus in de linkerstaart van de grafieken in de figuren 1 en 2, die eindeloos naar links doorlopen zonder echt nul te worden. Zonder integratie over het gehele brede traject komt het berekende debiet te laag uit, en bij een ondergrens van z = -8 zelfs veel te laag.

Wat boven is beschreven bleek door vergelijking met de juiste verloop van het debiet zoals dat is verkregen (al zij het bij benadering) uit een simulatie met Modflow, het mijn eigen axiaal-symetrische fdm3t, en uit het resultaat van TTIM, en verder uit vergelijking met de inverse van de Laplace transform van de oplossing. De laatste kwam, na numerieke terugtransformatie met Graver-Stehfest, overeen met de andere numerieke resultaten. Na uitbreiding van het integratietraject tot -100 < z < 4 kwam ook de uitdrukking voor Q en de stijghoogte  $\phi$  met de integraal overeen alle andere berekenmethoden; alleen werkte µGraver-Stehfast niet voor de stijghoogte.

#### 2 Resultaten

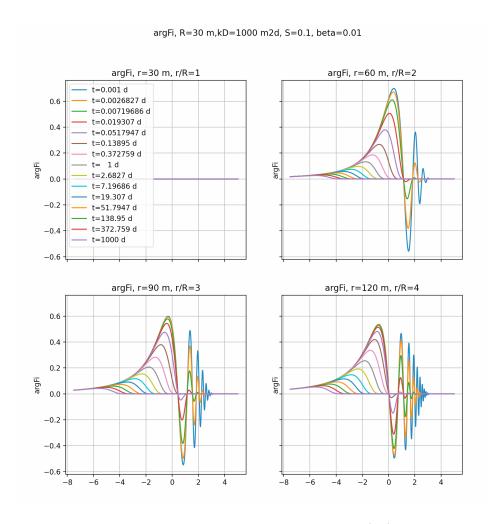
Het resultaat van deze uitgebreide exercitie is weergegeven in figuur 3. De legenda vertelt welk lijntype bij welke berekeningsmethode hoort, en de kleur vertelt voor welke afstand r de grafieken zijn gegeven. De radius van de cirkel met gegeven stijghoogte is vast,  $R=30\mathrm{m}$ . De afstanden zijn geen mooie rond getallen omdat een aantal afstanden is gekozen uit het numerieke grid, dat logarithmisch oploopt. De afzonderlijke lijnmarkers zijn de tijdstippen waarvoor elk puntje is berekend.

Allereerst, de numerieke uitkomsten van Modflow (MF6) het eigen eindige differentiemodel (fdm3t) en Mark Bakker's TTIM komen alle drie goed met elkaar overeen, waarbij fdm3t gezien de overeenkomst met TTIM bij kleine tijden nauwkeuriger is dan Modflow. Dit laatste is te wijten aan het feit dat Modflow volledig impliciet rekent en fdm3t de mate van impliciet rekenen (epsilon) kan instellen tussen 0 en 1 (de gebruikte epsilong staat in de titel van de figuur).

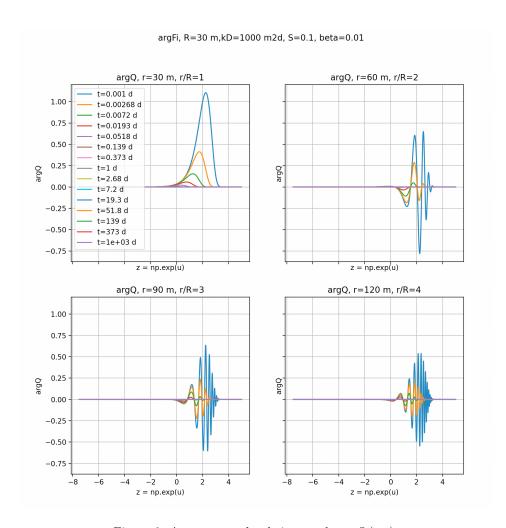
Vervolgens blijkt de terugtransformatie van de Laplace getransformeerde functie met Graver-Stehfest, op een "hik" na aan het begin van elke curve, voor het debiet goed te werken (paarse lijn met puntjes). Voor de berekening van de stijghoogte, werkt Graver-Stehfest helemaal niet. Daar moet blijkbaar een (geheel) andere methode voor de terugtransformatie worden gekozen. Cohen(2007) geeft enkele tientallen methoden, en verwijst naar een website op zijn universiteit waar de code te vinden is. Ik heb geen poging gedaan.

Tenslotte blijkt het direct numeriek integreren van de door Bruggeman gegeven oplossing 223.03 goed te werken voor zowel de stijghoogte (behalve de allereerste puntjes) als het debiet (gehele traject), echter geldt dit alleen onder de voorwaarde dat het integratietraject heel breed wordt gekozen, hier tussen  $-100 \le z \le 4$  oftwel voor u $e^{-100} \le u \le e^4$ , waarbij aangetekend zij, dat het traject is opgebroken in het stuk  $-100 \le z \le -8$  en het traject  $-8 \le z \le 4$  om zowel hoofd te kunnen bieden aan de uiterst traag naar nul dalende tak links, als de oscillaties in de tweede tak rechts. De standaard functie 'scipy.integrate.quad' heeft er dan geen moeite mee. Volgens de hulp bij de functie quad mag ook -np.inf worden gebruikt als ondergrens, waarbij quad dan op een Fourrier-transformatie overschakelt, maar dat werkt bij deze functie helemaal niet. Vandaar dat het beste gewoon een voldoend breed integratietraject kan worden gekozen.

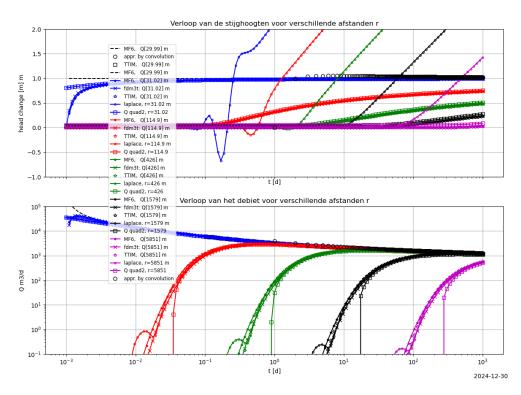
Ter verduidelijking geeft figuur 4 een vergelijking tussen de uitkomst van de directe numerieke integratie



Figuur 1: Argument onder de integraal van  $\phi\left(t,r\right)$ 



Figuur 2: Argument onder de integraal van  $Q\left(t,r\right)$ 



Figuur 3: Uitkomsten van: Modflow, fdm3t, TTIM, Laplace, directe numerieke integratie van de integraal (Fiquad, Qquad) en benaderd met convolutie en analytische Bruggeman 223\_02.

van oplossing 223.03 afhankelijk van de breedte van het integratietraject zoals aangegeven met a = z[0] en b = z[-1] in de legenda. Zowel de berekende stijghoogte als het berekende debiet wijken af van de juiste uitkomst bij een te geringe overspanning van dit traject.

Figuur 5 geeft dezelfde figuur, maar nu met detail voor Q. Hieruit blijkt dat Qsteevast (veel) te laag uitkomt als een te kleine breedte van het integratietraject wordt gekozen. Dit was de reden waarom de uitkomsten van deze directe wijze van het berekenen van de integraal veel lager uitkwamen dan de numerieke waarden en de waarden van TTIM.

De grafieken voor Q bevatten ook de waarden van de berekening van de integraal met een eenvoudige Simpson methode (trapezium regel), daarbij het traject eveneens opgesplitst en gebruik makend van 100000 puntjes. Bij dit aantal puntjes is de uitkomst van de eenvoudige Simpsonmethode in 6 significante cijfers gelijk aan de quadmethode.

Ook is in de figuur te zien dat de numerieke Laplace investie met Graver Stehfest voor de

#### 3 Integraal direct numeriek berekenen

De integraal berekenen blijkt moeilijk door het uiterst trage dalen van het argument voor afnemende z. Dit was voor het debiet het geval, maar geldt evenzeer voor het arugment onder integraal voor de uitdrukking van de stijghoogte (zie figuren). Om dit effect te compenseren en met quad toch een goede integratie over het gehele traject te krijgen is het traject opgedeeld in een stuk links met  $-100 \le z \le -8$  en een stuk rechts over het traject  $-8 \le z \le 4$ . Het stuk links rijkt dus over 92 logcycli van u, is zeer glad en kan zo met quad goed worden berekend. Het stuk rechts is waar de functie sterk verandert en mogelijk een beperkt aantal oscillaties heeft, die quad gemakkelijk aan kan. Dit bijkt goed te werken.

Een eenvoudige integratie met de Simpson (trapezium) methode, ook opgesplitsts en over het zelfde traject genomen met 100000 punten levert in 6 significante cijfers dezelfde uitomst als de standaard functie 'scipy.integrate.quad'.

### 4 De Laplace transformatie

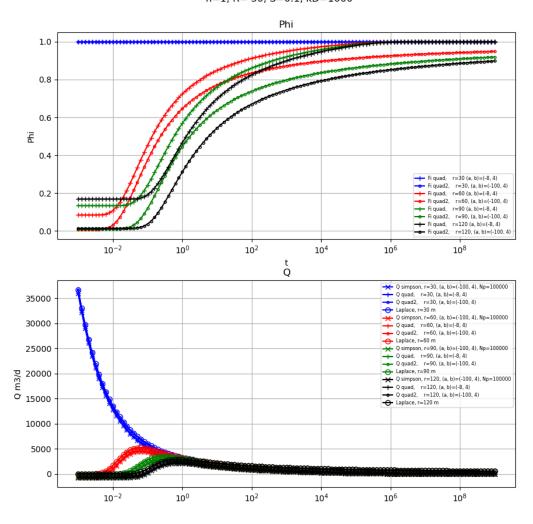
#### 4.1 De stijghoogte

Ed Veling stuurde me de Laplace getransformeerde op van de oplossing van de pde met zijn randvoorwaarde. Ik leid die hier nu zelf af, en kom daarmee ook op zijn uitkomst:

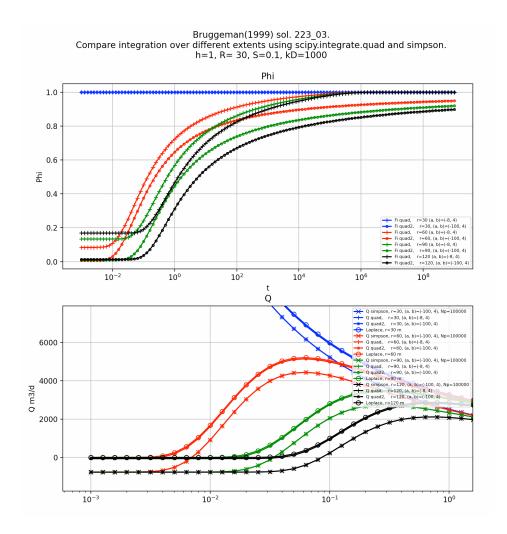
$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} = \beta^2 \frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad \beta^2 = \frac{S}{kD}, \quad \phi\left(0, r \ge R\right) = 0, \quad \phi\left(t, R\right) = h$$
 
$$L\left\{\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2}\right\} + L\left\{\frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r}\right\} = L\left\{\beta^2 \frac{\partial \phi}{\partial t}\right\}, \quad \beta^2 = \frac{S}{kD}, \quad L\left\{\phi\left(0, r \ge R\right)\right\} = 0, \quad L\left\{\phi\left(t, R\right)\right\} = L\left\{h\right\}$$
 
$$\frac{d^2\overline{\phi}}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\overline{\phi}}{dr} = \beta^2 \int\limits_0^\infty e^{-st} \frac{\partial \phi}{\partial t} dt = \beta^2 \left[e^{-st}\phi\right]_0^\infty - \beta^2 \int\limits_0^\infty \phi de^{-st} = -\beta^2 \phi_{(r,0)} + \beta^2 s \int\limits_0^\infty e^{-st} \phi dt = 0 + \frac{\beta^2}{s} \overline{\phi}$$
 
$$\frac{d^2\overline{\phi}}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\overline{\phi}}{dr} = \beta^2 s \overline{\phi}$$

Deze gewone differentiaalvergelijking heeft als algemene oplossing  $\overline{\phi} = AK_0 (r\beta\sqrt{s}) + BI_0 (r\beta\sqrt{s})$ . B = 0 omdat  $I_0$  geen asymptotisch verloop naar nul heeft voor grote r. Zodat

$$\overline{\phi} = AK_0 \left( r\beta \sqrt{s} \right)$$



Figuur 4: Vergelijking uitkomsten integratie Bruggeman (1999) oplossing 223.03 afhankelijk de breedte van het integratietraject.



Figuur 5: Vergelijking uitkomsten integratie Bruggeman (1999) als boven met detail voor Q goed werkt althans voor r < 4R. De numerieke Laplace inverse werkt niet goed voor de stijghoogte (hier niet opgenomen).

A volgt uit de randvoorwaarde,  $\phi = h$  voor r = R dus  $L\{\phi\} = L\{h\}$  voor r = R zodat  $L\{\phi\} = \overline{\phi} = \frac{h}{s}$  voor r = R. Dit levert

$$\frac{h}{s} = AK_0 \left( R\beta \sqrt{s} \right) \rightarrow A = \frac{h}{s} \frac{1}{K_0 \left( R\beta \sqrt{s} \right)}$$

en, tenslotte, de gezochte laplace getransformeerde  $\overline{\phi}$ :

$$\overline{\phi} = \frac{h}{s} \frac{K_0 (r\beta \sqrt{s})}{K_0 (R\beta \sqrt{s})}$$

Dit is de oplossing die Ed me toestuurde.

#### 4.2 Det debiet

Het debiet over een ring met straal r is gelijk aan

$$Q\left(r,t\right) = -2\pi rkD\frac{\partial\phi}{\partial r}$$

De Laplace transform hiervan is

$$\begin{split} L\left\{Q\left(r,t\right)\right\} &= L\left\{-2\pi r k D \frac{\partial \phi}{\partial r}\right\} \\ \overline{Q}\left(r,s\right) &= 2\pi r k D \beta \sqrt{s} \frac{h}{s} \frac{K_1\left(r\beta\sqrt{s}\right)}{K_0\left(R\beta\sqrt{s}\right)}, \ \beta = \sqrt{\frac{S}{kD}} \\ \overline{Q}\left(r,s\right) &= 2\pi r \sqrt{kDS} \frac{h}{\sqrt{s}} \frac{K_1\left(r\beta\sqrt{s}\right)}{K_0\left(R\beta\sqrt{s}\right)} \end{split}$$

Deze  $\overline{Q}$  kan numeriek worden terug getransformeerd.

#### 4.3 Terugtranformatie

Er bestaan minstens enkele tientallen procedures om functies vanuit het Laplace domain terug te transformeren naar de gewone domein (zie literatuur). Cohen (2007) die de meest uitgebreide beschrijving van deze methoden geeft, waarschuwt voor cijferverlies bij grote t en de onvoorspelbaarheid dat een bepaalde methode altijd een goed antwoord geeft. Hij beveelt dan ook sterk aan om altijd verschillende methoden toe te passen om te controleren of de antwoorden consistent zijn en met elkaar overeen komen. Een van de meest wijd verbreide methoden en vaak ook robuust, mits het aantal termen niet groter wordt dan ca. 18 is de methode van Graver-Stehfest (Cohen (2007), p178). Ik heb die hier toegepast op zowel de Laplace getransformeerde stijghoogte en het debiet. De terugvertaling van de Laplace getransformeerde stijghoogte leverde geen zinvol resultaat. Voor het debiet lukte dat wel. Het terug transformatie van het debiet levert een debietsverloop dat overeen komt met dat van de andere berekeningsmethoden. Dit was ook het geval voor r > R ondanks het feit dat er dan oscillaties ontstaan. Dat het toch werkt, is te wijten aan het feit dat het aantal oscillaties zeer beperkt is omdat voor grotere waarden van z of u het argument (expoonentieel) snel naar nul gaat en de verder oscillaties dan geen rol meer spelen.

#### 4.4 Graver-Stehfest algorithm

Beide methoden hieronder leveren dezelfde coëfficiënten op. Let daarbij op dat de coefficienten floats zijn en geen ints. De som van de coefficienten is steeds exact (in alle significante cijfers op de computer) gelijk aan 0.0. See AW

$$f_g(t, M) = \frac{\ln 2}{t} \sum_{k=1}^{2M} \zeta_k \hat{f}\left(\frac{\ln 2}{t}k\right)$$

Een elegante formulering van de coefficienten is deze (Abte and Whitt (20??)):

$$\zeta_k = (-1)^{M+k} \sum_{j=(k+1)/2}^{\min(k,M)} \frac{j^{M+1}}{M!} \begin{pmatrix} M \\ j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2j \\ j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j \\ k-j \end{pmatrix}$$

Alternative formulering (Egon2012), exactly as in Cohen (2007) en in Hemker's (2000) PhD.

$$f(t,N) = \frac{\ln 2}{t} \sum_{i=1}^{N} G_i \hat{f}\left(\frac{\ln 2}{t}i\right)$$

$$G_i = (-1)^{N/2 - i} \sum_{j=(i+1)//2}^{\min(i,N/2)} \frac{j^{N/2}(2j) 1}{(N/2 - j)! j! (j-1)! (i-j)! (2j-1)!}$$

# 5 Integratie langs de log as in situaties if integration is to be done to infinity

Wanneer het integratietraject voor u over a groot aantal log cycli kan lopen, is het vaak te verkiezen om dan langs een log-as te integreren. Dit blijkt ook noodzakelijk om met de standaard numerieke integratiefunctie scipy.integrate.quad zinvolle uitkomsten te krijgen.

$$y = \int_{u=u_0}^{u_1} f(u) du$$
$$y = \int_{u=u_0}^{u_1} f(u) u d \ln u = \int_{z=\ln(u_0)}^{z=\ln(u_1)} f(u = e^z) dz$$

#### Referenties

[1]

[Abte and Whitt (20??)] Abate, J and Whitt, W (????) Unified framework for numerically inverting Laplace Transforms. J oseph Abate, 900 Hammond Rd, Ridgewood, New Jersey 07450-2908, USA., Ward Whitt, Dept of Industrial Eng. and Operations, Clumbia Univ., New York, New York 10027-6699, USA, ww2040@Columbia.edu. Pdf document, Internet. 30pp.

[Egonmwan (2012)] Egonmwan, A.O. (2012) The numerical inversion of the Laplace transform. MSc report. Eindhoven University of Technology. Esp. Chapter 6.