

MIECZYSLAW CHALFEN*

O pewnej transformacji równania dyspersji hydrodynamicznej

1. Wstęp

Problematyka ochrony zasobów wodnych podejmowana jest w wielu aspektach. Jednym z nich jest budowa matematycznych modeli służących do prognozowania rozprzestrzeniania zanieczyszczeń w strefie pełnego nasycenia ośrodka gruntowego w wodę. Do opisu zmian koncentracji zanieczyszczeń w dwuwymiarowym płaskim układzie współrzędnych stosuje się najczęściej równanie dyspersji hydrodynamicznej (Bear 1972, Maciejewski 1980)

$$(1 + \beta) c_t = \operatorname{div} (D \operatorname{grad} c) - \vec{v} \operatorname{grad} c + I \quad (1)$$

gdzie:

- c - stężenie zanieczyszczeń $[m/L^3]$,
- x, y - zmienne przestrzenne, $(x, y) \in \Omega$,
- t - czas,
- $\vec{v} = [v_1, v_2]$ - wektor rzeczywistej prędkości przepływu wód gruntowych $[L/T]$,
- $D = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{bmatrix}$ - tensor dyspersji $[L^2/T]$,
- I - funkcja źródłowa,
- β - współczynnik adsorpcji.

Składowe tensora dyspersji D wyrażają się wzorami:

$$\begin{aligned} D_{11} &= \alpha_1 \frac{v_x^2}{v} + \alpha_t \frac{v_y^2}{v} + Dm \\ D_{22} &= \alpha_t \frac{v_x^2}{v} + \alpha_1 \frac{v_y^2}{v} + Dm \end{aligned} \quad (2)$$

*Dr M. CHALFEN, Katedra Matematyki, Akademia Rolnicza we Wrocławiu, ul. Grunwaldzka 53, 50-357 Wrocław

$$D_{12} = D_{21} = (\alpha_1 - \alpha_t) \frac{v_x v_y}{v}$$

gdzie:

- α_1 - stała dyspersji podłużnej [L],
- α_t - stała dyspersji poprzecznej [L],
- Dm - współczynnik dyfuzji molekularnej [L²/T],
- $\vec{v} = |\vec{v}|$ - długość wektora prędkości.

Do przybliżonego rozwiązania równania (1) stosuje się przeważnie metody różnicowe lub metodę elementu skończonego (MES), a nieliczne rozwiązania analityczne równania (1) z odpowiednio dobranymi warunkami początkowo-brzegowymi wykorzystuje się do badania dokładności stosowanych metod. Opracowanie wystarczająco dokładnej metody dla (1) nastęrcza jednak badaczom sporo trudności, spowodowanych istnieniem członu adwekcyjnego \vec{v} grad c . Zastosowanie do rozwiązania (1) prostych schematów różnicowych lub MES z liniowymi funkcjami bazowymi powoduje wystąpienie charakterystycznych oscylacji (Fletcher 1984). Rozwiązania tracą monotoniczny charakter, a nawet pojawiają się obszary z ujemną koncentracją zanieczyszczeń. Spośród prób przeciwdziałania tym zjawiskom należy wymienić metodę współrzędnych wędrujących dla jednowymiarowej postaci równania (1) (Maciejewski 1984), schematy Pietrowa-Galerkina (Fletcher 1984), MES z nieliniowymi funkcjami bazowymi (Finite Elements 1987), czy też różne aproksymacje pochodnej czasowej c_t (Connor, Brebbia 1984, Princewill 1988, Holzbacher 1988). Metody te są przeważnie warunkowo stabilne, ograniczenie na krok czasowy jest zwykle formułowane w postaci warunku Couranta (Potter 1982, Batta 1982). W niniejszej pracy przedstawiono prosty sposób ominięcia problemów jakie stawia człon adwekcyjny przy dodatkowym założeniu stałego pola prędkości $\vec{v} = \text{const}$.

2. Transformacja równania (1)

Skoro źródłem problemów z rozwiązaniem (1) jest człon adwekcyjny, to nasuwa się pomysł dokonania takiej transformacji (1) by człon ten zniknął. Można tego dokonać bez zmian układu współrzędnych przy założeniu, że $\vec{v} = \text{const}$. Wówczas dobierając układ współrzędnych tak, by oś OX była równoległa do wektora \vec{v} , mamy $\vec{v} = [v, 0]$, co pociąga za sobą

$$D_{11} = \alpha_1 v + Dm, \quad D_{22} = \alpha_t v + Dm, \quad D_{12} = D_{21} = 0.$$

Równanie (1) redukuje się do postaci

$$(1 + \beta)c_t = D_{11} c_{xx} + D_{22} c_{yy} - v c_x + I \quad (3)$$

Poprzez proste różniczkowanie można stwierdzić, że: jeżeli c jest rozwiązaniem równania (3) z warunkiem początkowym

$$c(x, y, 0) = c_0(x, y), \quad (x, y) \in \Omega \quad (4)$$

oraz warunkiem brzegowym typu Dirichleta

$$c(x, y, t) = c_b(x, y, t), \text{ dla } (x, y) \in \Gamma_1 \subset \Omega \quad (5)$$

lub warunkiem Neumanna

$$c_{\vec{n}}(x, y, t) = q_b(x, y, t), \text{ dla } (x, y) \in \Gamma_2 \subset \Omega \quad (6)$$

gdzie c_o, c_b, q_b – są zadanymi funkcjami, \vec{n} – wektorem normalnym do brzegu, to funkcja

$$\theta(x, y, t) = c(x, y, t)\phi^{-1}(x, t)$$

gdzie

$$\phi(x, t) = \exp \left[\frac{v}{2D_{11}}x - \frac{v^2}{4D_{11}(1+\beta)}t \right] \quad (7)$$

jest rozwiązaniem równania

$$(1+\beta)\theta_t = D_{11}\theta_{xx} + D_{22}\theta_{yy} + I\phi^{-1} \quad (8)$$

z warunkiem początkowym

$$\theta(x, y, 0) = c_o(x, y)\phi^{-1}(x, 0) \quad (9)$$

i warunkiem Dirichleta

$$\theta(x, y, t) = c_b(x, y, t)\phi^{-1}(x, t) \quad (10)$$

lub warunkiem mieszanym

$$\theta_{\vec{n}}(x, y, t) = q_b(x, y, t)\phi^{-1}(x, t) - \cos(\vec{n}, \vec{x})\frac{v}{2D_{11}}\theta \quad (11)$$

Tak więc, by uzyskać rozwiązanie zagadnienia (3–4–5–6) wystarczy rozwiązać zagadnienie (8–9–10–11), a wynik pomnożyć przez ϕ . Równanie (8) jest klasycznym równaniem ciepła, dla którego zarówno MES, jak też niejawne schematy różnicowe są absolutnie stabilne (Potter 1982, Singh 1977) i dają wyniki wystarczająco dokładne w zastosowaniach w hydrogeologii. Warto nadmienić, że podobną transformację można zastosować także do równania dyspersji hydrodynamicznej w modelach jedno- i trójwymiarowych.

W dalszej części pracy zastosowano MES do równania (8) po transformacji (7), a także bezpośrednio do równania (3). Wykorzystano najprostszą wersję MES z liniowymi funkcjami bazowymi i podziałem obszaru Ω na elementy trójkątne. Dyskretyzacji pochodnej czasowej dokonano zgodnie ze schematem Crancka-Nicholsona.

3. Test dokładności

Najlepszym sposobem badania poprawności i dokładności nowych metod jest zastosowanie proponowanych algorytmów do rozwiązania zagadnień, dla których znane jest rozwiązanie analityczne. Testowanie nowych metod na materiale empirycznym wymaga zwykle wstępnego tarowania modelu, a różnice wartości pomierzonych i obliczonych przy weryfikacji mogą być powodowane zarówno błędami metody, jak i błędami pomiaru.

Szukając rozwiązań analitycznych równania (3) założono dodatkowo, że $Dm = 0$, $I = 0$, $\beta = 0$. Równanie (3) ma wtedy postać

$$c_t = \alpha_1 v c_{xx} + \alpha_t v c_{yy} - v c_x \quad (12)$$

a jednym z jego szczególnych rozwiązań jest funkcja jednomodalna (Holzbacher 1988)

$$c_\alpha(x, y, t) = \frac{M_o}{\lambda t} \exp \left[-\frac{(x - vt)^2}{4\alpha_1 vt} - \frac{y^2}{4\alpha_t vt} \right]$$

gdzie: $\lambda = 4v\pi\sqrt{\alpha_1 \alpha_t}$.

M_o jest całkowitą masą zanieczyszczeń.

Stosując obie opisane poprzednio metody rozwiązano równanie (12) z warunkiem początkowym

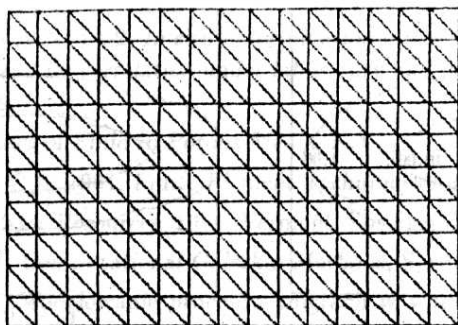
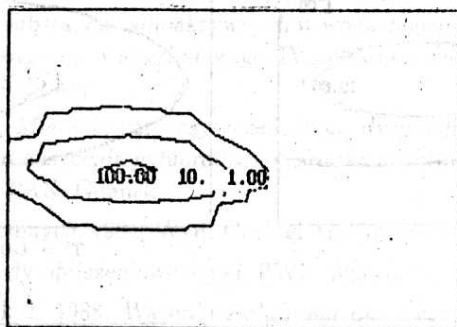
$$c(x, y, 0) = c_\alpha(x, y, t_o), \text{ dla pewnego } t_o > 0$$

oraz warunkiem brzegowym typu Dirichleta

$$c(x, y, t) = c_\alpha(x, y, t) \text{ dla } (x, y) \in \Gamma \subset \Omega$$

Obszar Ω o wymiarach 150 m \times 100 m, podzielono na 300 jednakowych trójkątów (rys.1). Przyjęto często spotykane wartości stałych dyspersji $\alpha_1 = 10$ m, $\alpha_t = 1$ m oraz $v = 1$ m/doba, $M_o = 50000$ g (Ochrona Wód Podziemnych 1984). Na rys. 2 przedstawiono początkowy rozkład zanieczyszczeń. Przeprowadzono symulację okresu 100 dobowego z krokiem czasowym $\Delta t = 1$ doba. Na rys. 3 zilustrowano linie jednakowych stężeń zanieczyszczeń w wybranych chwilach czasowych obliczone obiema metodami. Przy zastosowaniu metody klasycznej pojawiają się oscylacje oraz ujemne stężenia. Występują one także przy obliczeniach prowadzonych z mniejszym krokiem czasowym, a gdy Δt wzrasta, błędy te szybko się powiększają. Uwidacznia się także negatywny wpływ na otrzymywane rezultaty celowo dobranej asymetrycznej siatki wprowadzającej pewną anizotropię. Metoda zmodyfikowana wolna jest od tych nieprawidłowości, a ponadto daje dokładniejsze wyniki.

Przedstawiony na rys. 3 zasięg chmury zanieczyszczeń, zdefiniowany jako granica obszaru o stężeniu większym niż 1% maksymalnego stężenia początkowego, jest dla metody zmodyfikowanej prawie identyczny jak w rozwiązaniach analitycznych.

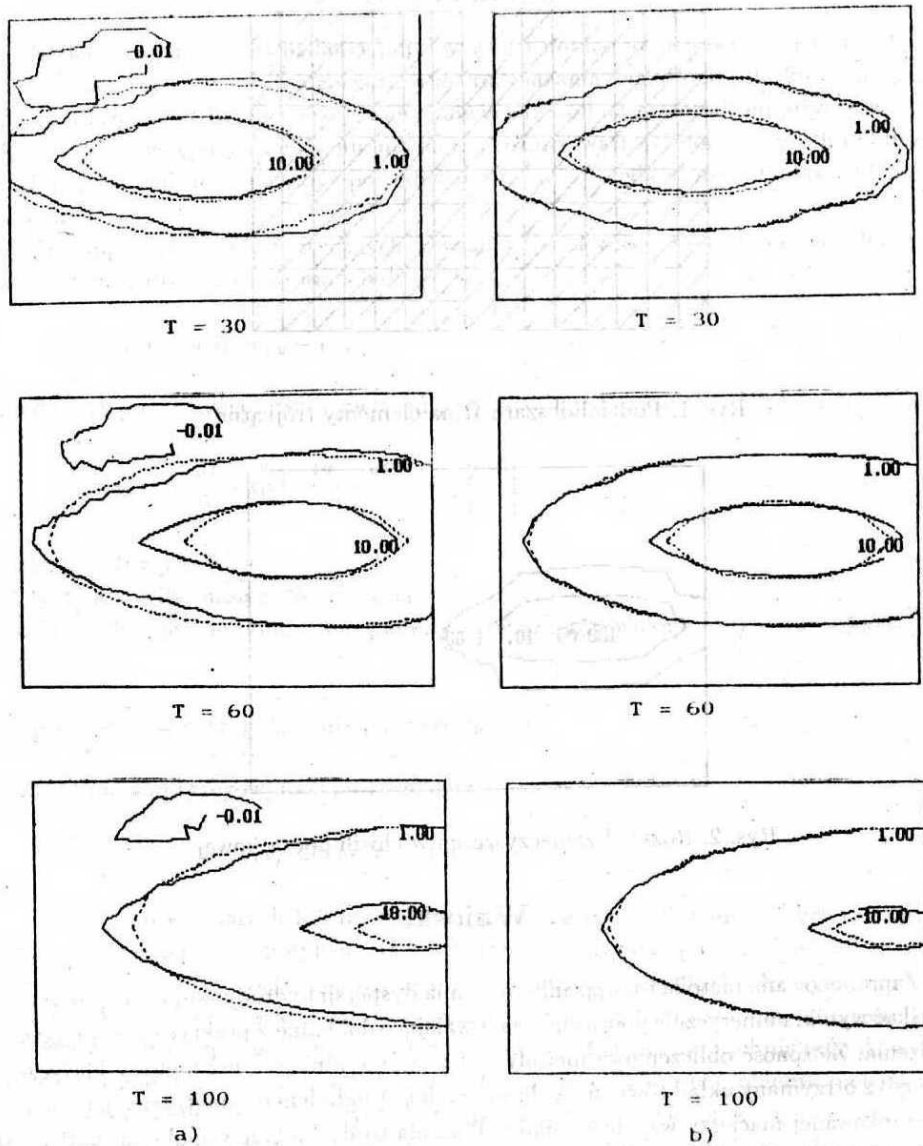
Rys. 1. Podział obszaru Ω na elementy trójkątne

Rys. 2. Rozkład zanieczyszczeń w chwili początkowej

4. Wnioski

Zaproponowana metoda rozwiązania równania dyspersji hydrodynamicznej pozwala uzyskać wyniki numerycznie poprawne i zadowalająco dokładne z praktycznego punktu widzenia. Złożoność obliczeniowa metody jest znacznie mniejsza niż metody klasycznej, gdyż otrzymany układ równań algebraicznych jest układem o symetrycznej, dobrze uwarunkowanej macierzy współczynników. Pozwala to dyskretyzować obszar siatką o większej liczbie elementów oraz wykorzystać do rozwiązania otrzymanego układu równań szybkie metody numeryczne (np. metoda rozkładu QL , lub iteracyjna metoda gradientów sprzężonych).

Omówioną transformację równania dyspersji hydrodynamicznej można stosować, gdy pole prędkości przepływu wód gruntowych jest niezmiennie w przestrzeni, lub gdy z powodu braku szczegółowego rozpoznania hydrogeologicznego prędkość ta zostaje zastąpiona wartością średnią.



Rys. 3. Linie jednakowych stężeń w wybranych chwilach symulacji
 a) - przed transformacją, b) - po transformacji
 ——— roz. numeryczne, roz. analityczne

Literatura

- Batta R.K., Murty V.V.N. 1982, *In situ determination of the hydrodynamics dispersion coefficient and its correlation under laboratory and field conditions*, Journal of Hydrology, 59.
- Bear I. 1982, *Dynamics of Fluid in Porous Media*, N.Y.
- Connor I.I., Brebbia C.A. 1984, *Finite Element Techniques for Fluid Flow. Finite Element in Water Resources*, 1984, Vermont, Springer-Verlag.
- Fletcher C.A.J. 1984, *Computational Galerkin Methods*, Springer-Verlag N.Y.
- Holzbacher E. 1988, *Modelowanie procesów migracji w wodach podziemnych*, VII Konferencja pt. „Matematyczne modelowanie ujęć wody podziemnej” w Janowicach.
- Kirkham D., Powers W.L. 1972, *Advanced Soil Physics*, Wiley-Inter. Science, N.Y.
- Maciejewski S., Partyka J., Zaradny H. 1980, *Model matematyczny do prognozowania koncentracji substancji radioaktywnych w wodach gruntowych dla przypadku skażenia punkowego i powierzchniowego*, IV polsko-czechosłowackie seminarium „Fizyka Wody Glebowej”.
- Maciejewski S. 1984, *Migracja zanieczyszczeń drogą dyspersji hydrodynamicznej w strefie niepełnego nasycenia jednorodnego ośrodka gruntowego*, praca doktorska, Inst. Bud. Wod. PAN, Gdańsk.
- Ochrona Wód Podziemnych*, 1984, Wyd. Geologiczne Warszawa.
- Potter D. 1982, *Metody obliczeniowe fizyki*, PWN Warszawa.
- Princewill G.B., Wilk J. 1988, *Warunki stabilności dla dwuwymiarowego równania migracji zanieczyszczeń wód podziemnych*, VII Konferencja pt. „Matematyczne modelowanie ujęć wody podziemnej” w Janowicach.
- Singh V.P. 1977, *Criterion of choose step length for some numerical methods used in hydrology*, Journal of Hydrology, 33.

Summary

If we assume that groundwater velocity is constant we can transform the hydrodynamics dispersion equation to form without advection term. This new equation is applied to modeling a contamination of pollutant in saturated zone. The finite element method is used to solve both equations. The numerical and analytical result were compared. The method proposed gives good results, without characteristic oscillations which exist if we applied FEM to basic equation. The proposed transformation may be used to one or three dimension model, too.