

Monika KALINOWSKA

Zakład Zasobów Wodnych, Instytut Geofizyki PAN
Water Resources Department, Institute of Geophysics PAS

Numeryczne rozwiązywanie dwuwymiarowego równania przenoszenia masy w rzekach

Numerical solutions of two-dimensional mass transport equation in rivers

Słowa kluczowe: dwuwymiarowe równanie adwekcji-dyfuzji, metody różnic skończonych, metoda kierunków naprzemiennych, metoda „pod-prąd”, transport zanieczyszczeń w rzekach, tensor dyspersji, dyfuzja numeryczna

Key words: two-dimensional advection-diffusion equation, finite differences methods, alternative direction implicit method, upwind method, river, pollution transport in rivers, dispersion tensor, numerical diffusion

Wprowadzenie

Ochrona i jakość wody to problemy będące w centrum uwagi na całym świecie. Zatem badania rzek mają często na celu kontrolę zanieczyszczeń i opracowanie sposobów postępowania w razie skażenia, do którego dochodzi w przypadku awarii, powodzi, pożaru czy też ludzkiej bezmyślności. Ewentualny zrzut zanieczyszczeń i ich rozprzestrzenienie może mieć zgubny wpływ zarówno na roślinność i zwierzęta zamieszkujące środowisko wodne, jak i na ludzi korzystających z ujęć wodnych.

Dlatego istotna jest informacja o stężeniu szkodliwych substancji rozpuszczonych w wodzie, jak również o sposobie rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń, aby we właściwym czasie można było podjąć odpowiednie kroki w celu zminimalizowania skażenia. Wymaga to złożonej analizy i opisu przepływu wody i transportu rozpuszczonych w niej substancji.

Modele przepływu i transportu prowadzą do równań różniczkowych nieposiadających rozwiązań analitycznych dla rzeczywistych przypadków. Równania takie można rozwiązywać, stosując metody numeryczne. Dobór metody rozwiązania zależy zarówno od rozpatrywanego przypadku, jak i czasu i dostępnych mocy obliczeniowych. W wielu przypadkach dobór ten jest trudny i wymaga kompromisu między kosztem obliczeniowym i czasem rozwiązania równań oraz możliwością pozyskania danych fizycznych dla danego modelu a pożądaną dokładnością wyniku.

W artykule przedstawiono model matematyczny transportu masy w przypadku dwuwymiarowym i na podstawie przeprowadzonych testów dokładności, stabilności i czasu obliczeń zaproponowano metodę numeryczną odpowiednią do jego rozwiązania.

Dwuwymiarowe równanie przenoszenia adwekcyjno-dyfuzyjnego

Rozważanym problemem jest proces transportu pasywnych substancji rozpuszczonych w wodzie (mogą nimi być różnego rodzaju zanieczyszczenia) w kanałach otwartych. Większość naturalnych rzek i kanałów jest płytka w porównaniu z ich szerokością i długością, dlatego też proces (za wyjątkiem początkowego odcinka) może być reprezentowany przez uśrednione wzdłuż głębokości dwuwymiarowe, adwekcyjno-dyfuzyjne równanie różniczkowe:

$$h(\mathbf{x}) \frac{\partial c(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nabla(h(\mathbf{x})\mathbf{D}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla c(\mathbf{x}, t)) + \nabla(h(\mathbf{x})\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \cdot c(\mathbf{x}, t)) \quad (1)$$

gdzie:

t – czas,

$\mathbf{x} = (x, y)$ – współrzędne położenia,

$c(\mathbf{x}, t)$ – stężenie,

$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ – pole prędkości,

h – lokalna głębokość,

$\mathbf{D}(\mathbf{x}, t)$ – tensor dyspersji.

Konsekwencją uśrednienia równania transportu w pionie jest pojawienie się dyspersji, która jest istotna w procesach transportu w kanałach otwartych. Pojawiające się w równaniu współczynniki dyspersji zależą od geometrii kory-

ta, dynamiki i turbulencji przepływu i są często trudne do określenia. W ogólnym przypadku w układzie kartezjańskim współczynniki te tworzą niediagonalny tensor:

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{bmatrix} \quad (2)$$

Z dostępnych w literaturze wzorów analitycznych lub danych eksperymentalnych otrzymujemy informację na temat podłużnego D_L i poprzecznego D_T współczynnika dyspersji dla danej rzeki czy kanału. Jeżeli nie da się osi układu współrzędnych skierować wzdłuż głównych kierunków przepływu, to należy wyznaczyć wszystkie elementy tensora (2).

Prawidłowym podejściem jest obrót diagonalnego tensora:

$$\mathbf{D}_D = \begin{bmatrix} D_L & 0 \\ 0 & D_T \end{bmatrix} \quad (3)$$

o kąt, jaki tworzy w danym punkcie wektor prędkości (kierunek przepływu) z osią x układu współrzędnych:

$$\mathbf{D} = \mathbf{R}(\alpha) \cdot \mathbf{D}_D \cdot \mathbf{R}^{-1}(\alpha) \quad (4)$$

gdzie $\mathbf{R}(\alpha)$ – macierz obrotu o kąt α .

W sytuacji gdy kierunek przepływu jest równoległy do osi rzędnych, poza-diagonalne składowe tensora są równe zero. Zamiast pełnego równania możemy wtedy rozwiązywać uproszczone równanie:

$$\begin{aligned}
& h \left(\frac{\partial c}{\partial t} + v_x \frac{\partial c}{\partial x} + v_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) = \\
& = \frac{\partial}{\partial x} \left(hD_L \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(hD_T \frac{\partial c}{\partial y} \right)
\end{aligned} \tag{5}$$

Opisywanie i rozwiązywanie problemu z użyciem uproszczonego równania (5) to niezwykle często stosowana praktyka w literaturze tematu, w tym w wielu przypadkach zupełnie nieświadoma. Innym spotykanym błędem jest utożsamianie współczynników dyspersji ze współczynnikami dyfuzji turbulentnej, występującymi w pełnym trójwymiarowym równaniu transportu.

Informacja o współczynnikach dyspersji jest niezbędna do rozwiązania równania transportu zarówno w postaci (1), jak i (5). Oprócz współczynników dyspersji musimy znać także pole prędkości w kanale i zadać odpowiednie warunki brzegowe i początkowe.

Metoda kierunków naprzemiennych

W naturalnych warunkach przepływu równanie transportu (1), z odpowiednimi warunkami brzegowymi i początkowymi, nie ma rozwiązania analitycznego i dlatego problem musi być rozwiązywany numerycznie. Stosując metody numeryczne, należy liczyć się z ewentualnymi błędami numerycznymi lub niemożliwością dokonania obliczeń.

W badaniach brano pod uwagę jedno z najczęściej stosowanych do rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych – metody różnic skończonych. Polegają one na bezpośrednim zastąpie-

niu równania różniczkowego przez odpowiednie równanie różnicowe. Z przetestowanych pod kątem dokładności, stabilności i szybkości metod różnic skończonych najlepsze wyniki osiąga metoda kierunków naprzemiennych (Alternative Direction Implicit method – ADI). Metoda ta jest stabilna, dokładna i relatywnie szybka. Stosując prostokątną siatkę punktów na płaszczyźnie x, y (rys. 1), wartości stężenia, przy stałej głębokości kanału, w kolejnym kroku czasowym w wewnętrznych punktach siatki wyznaczone są według formuł (6) i (7).

Krok 1 – niejawnym w kierunku x , jawnym w kierunku y :

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \left[2 + v_x \Delta t \nabla_x - D_{xx} \Delta t \delta_x^2 \right] C_{i,j}^{n+1/2} = \\
& = \left[1 - v_y \Delta t \nabla_y + D_{yy} \Delta t \delta_y^2 \right] C_{i,j}^n + \\
& + \frac{1}{2} \left[-v_x \Delta t \nabla_x + D_{xx} \Delta t \delta_x^2 + 2D_{xy} \Delta t \delta_{xy} \right] C_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{6}$$

Krok 2 – jawnym w kierunku x , niejawnym w kierunku y :

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \left[2 + v_y \Delta t \nabla_y - D_{yy} \Delta t \delta_y^2 \right] C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^{n+1/2} + \\
& - \frac{1}{2} \left[-v_x \Delta t \nabla_x + D_{xx} \Delta t \delta_x^2 \right] C_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{7}$$

gdzie:

$c_{i,j}^n$ – wartość stężenia w punkcie (i, j) siatki obliczeniowej w n -tym kroku czasowym,
 Δx i Δy – kroki przestrzenne,
 Δt – krok czasowy,

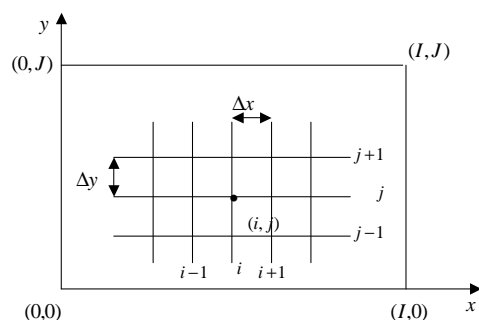
$\nabla_x, \nabla_y, \delta_{xx}, \delta_{xy}, \delta_{yy}$ – operatory różnicowe.

W analizowanym przypadku operatory różnicowe wynoszą odpowiednio:

$$\nabla_x C_{i,j} = (c_{i+1,j} - c_{i-1,j}) / 2\Delta x,$$

$$\delta_{xx} C_{i,j} = (c_{i-1,j} - 2c_{i,j} + c_{i+1,j}) / \Delta x^2,$$

$$\delta_{xy} C_{i,j} = \frac{c_{i+1,j+1} - c_{i+1,j-1} - c_{i-1,j+1} + c_{i-1,j-1}}{4\Delta x \Delta y}$$



RYSUNEK 1. Prostokątna siatka o rozmiarze $\Delta x \times \Delta y$ na płaszczyźnie x, y
 FIGURE 1. Rectangular mesh of $\Delta x \times \Delta y$ units size on x, y plane

Metoda ADI była po raz pierwszy zaproponowana przez Douglasa (1955) i Peacemana i Rachforda (1955) do rozwiązania dwuwymiarowego równania transportu ciepła. Metoda, którą zastosowano w pracy do rozwiązywania dwuwymiarowego równania transportu, bazuje na niejawnym schemacie Cranka-Nicolsona (CN). Odpowiednie jego przekształcenia prowadzą do podziału kroku czasowego na dwie części (pierwszą niejawną tylko w kierunku x – formuła 6, drugą tylko w kierunku y – formuła 7), które następnie rozwiązu-

jemy w danym kierunku przestrzennym oddzielnie. Podział ten powoduje duże przyspieszenie obliczeń. Zamiast jednego dużego układu równań liniowych, który otrzymujemy, stosując schemat CN, dostajemy dwa trójdiagonalne układy. W przypadku takich układów możemy zastosować do ich rozwiązania metodę analityczną Thomasa dla macierzy blokowo-trójprzekątniowych (Fletcher 1991), która jest dużo szybsza niż metoda iteracyjna nadrelaksacji (SOR – Successive Over-Relaxation), najlepsza w przypadku schematu Cranka-Nicolsona. Jeszcze szybsze rozwiązanie można uzyskać, używając schematu „pod prąd” (Upwind – UP), który jest schematem jawnym, a dzięki temu wartości stężenia w kroku następnym zależą tylko od kroku obecnego. Problemem jednak przy jego stosowaniu jest generowana w trakcie obliczeń dyfuzja numeryczna, znacznie wpływająca na dokładność rozwiązania. Opis i testy schematów CN i UP dla dwuwymiarowego równania adwekcyjno-dyfuzyjnego można znaleźć w Kalinowskiej (2003) i Kalinowskiej i Rowińskim (2004).

Rozwiązanie numeryczne i analityczne dla prostego kanału

Przy stałych współczynnikach dyspersji i stałym polu prędkości w prostokątnym kanale o stałej głębokości rozwiązanie dwuwymiarowego równania transportu daleko od brzegów może być zapisane jako dwuwymiarowy rozkład Gaussa (Smith i Yongming 2001):

$$c(\mathbf{x}, t) = \frac{M}{2\pi\sqrt{4t^2 D}} \times \exp\left[-\frac{(x-\mu_x)^2}{4tD/D_{yy}} - \frac{(y-\mu_y)^2}{4tD/D_{xx}} + \frac{(x-\mu_x)(y-\mu_y)}{2tD/D_{xy}}\right] \quad (8)$$

gdzie:

$$\mu_x = x_0 + v_x t,$$

$$\mu_y = y_0 + v_y t, \quad D = D_{xx} D_{yy} - D_{xy}^2,$$

M – masa zrzucona w punkcie (x_0, y_0) w czasie $t = 0$.

Dla sytuacji, w której rozwiązanie analityczne istnieje, na rysunku 2 przedstawiono wyniki symulacji po 750 sekundach z użyciem metody ADI. Symulacje wykonano dla parametrów:

- krok czasowy $\Delta t = 0,5$ s,
- kroki przestrzenne $\Delta x = \Delta y = 1$ m,
- składowe prędkości

$$v_x = v_y = 0,106 \frac{\text{m}}{\text{s}},$$

- współczynniki dyspersji

$$D_{xx} = D_{yy} = 0,425 \frac{\text{m}^2}{\text{s}},$$

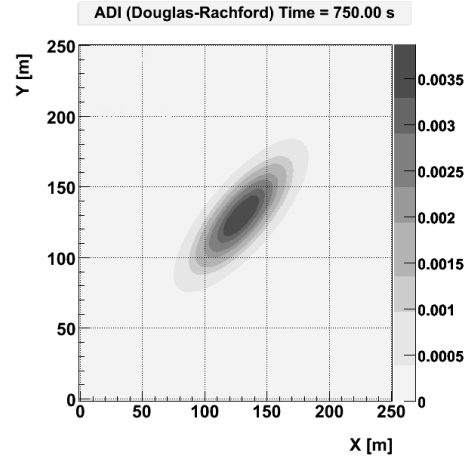
$$D_{xy} = D_{yx} = 0,325 \frac{\text{m}^2}{\text{s}},$$

- koncentracja początkowa zadana deltą Diraca

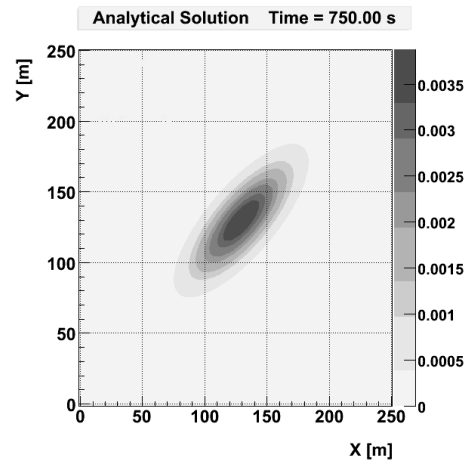
$M = 10$ j.a. zrzucona w punkcie

$$x_0 = y_0 = 50 \text{ m}.$$

Na rysunku 3 pokazano rozwiązanie analityczne dla tych samych parametrów, na rysunku 4 przedstawiono różnicę między rozwiązaniem analitycznym i numerycznym.



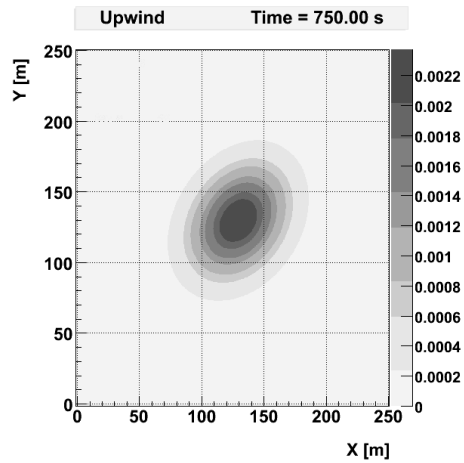
RYSUNEK 2. Wyniki symulacji z użyciem schematu ADI po 750 s
FIGURE 2. Simulation results with use of ADI scheme after 750 s



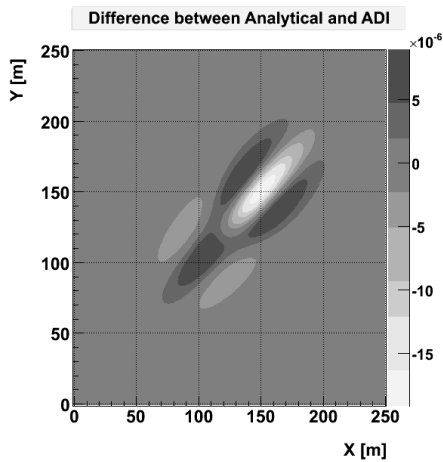
RYSUNEK 3. Rozwiązanie analityczne po 750 s
FIGURE 3. Analytical solution after 750 s

Zarówno w tym, jak i w wielu innych symulowanych przypadkach można zauważyć, że przy użyciu schematu ADI nie ma istotnej rozbieżności między rozwiązaniem analitycznym i numerycznym. Widoczna różnica jest

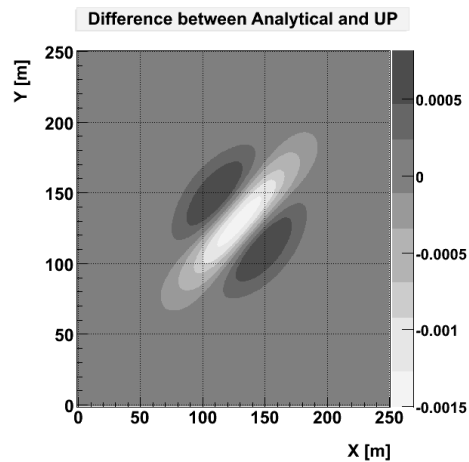
rzędu 10^{-5} , a maksymalna różnica między rozwiązaniem analitycznym i numerycznym to tylko 0,5% maksymalnej wartości stężenia wyznaczonej z rozwiązania analitycznego. Dla kontrastu na rysunku 5 przedstawiono wyniki symulacji dla tych samych parametrów z użyciem schematu UP. Różnica między rozwiązaniem analitycznym a numerycznym jest tutaj wyraźnie widoczna. Obserwowany efekt rozmycia rozkładu Gaussa jest wynikiem dyfuzji numerycznej generowanej przez schemat UP. Maksymalna różnica między rozwiązaniem analitycznym i numerycznym to aż 40% wartości maksymalnego stężenia rozwiązania analitycznego (rys. 6).



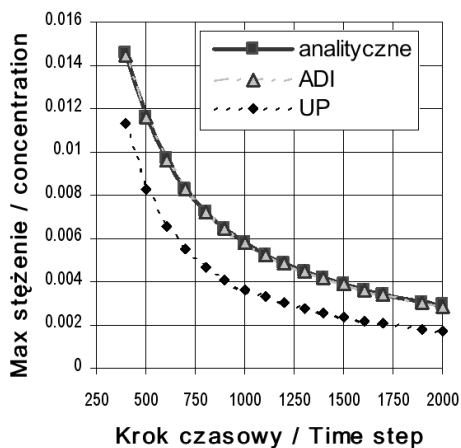
RYSUNEK 5. Wyniki symulacji z użyciem dla schematu UP po 750 s
 FIGURE 5. Simulation results with use of UP scheme after 750 s



RYSUNEK 4. Różnica między rozwiązaniem analitycznym i numerycznym (ADI) po 750 s
 FIGURE 4. Difference between analytical and numerical (ADI) solution after 750 s



RYSUNEK 6. Różnica między rozwiązaniem analitycznym i numerycznym (UP) po 750 s
 FIGURE 6. Difference between analytical and numerical solution (UP) after 750 s



RYSUNEK 7. Wartości maksymalnego stężenia w kolejnych krokach czasowych dla schematów ADI, UP i rozwiązania analitycznego
 FIGURE 7. Maximum concentration values for ADI and UP schemes and analytical solution at particular time steps

Analizując przykładowo wartości maksymalnego stężenia (istotnych z punktu widzenia ewentualnego skażenia), wyznaczane w kolejnych krokach czasowych symulacji, schemat ADI w testowym kanale sprawuje się idealnie (rys. 7). Dla porównania na wykresie umieszczono również wartości maksymalnego stężenia wyznaczone w tych samych krokach czasowych przez schemat UP. W tym przypadku wartości znacznie odbiegają od wartości otrzymanych z rozwiązania analitycznego.

Podsumowanie

W przypadku dobrego wymieszania w pionie transport substancji rozpuszczonych w wodzie może być reprezentowany przez uśrednione wzdłuż głębokości dwuwymiarowe, adwekcyjno-

-dyfuzyjne równanie różniczkowe. Należy pamiętać, że pojawiający się w równaniu w wyniku uśrednienia tensor dyspersji jest w ogólnym przypadku niediagonalny. Otrzymane równanie w rzeczywistych warunkach nie ma rozwiązania analitycznego i musi być rozwiązywane numerycznie. Testy przeprowadzone w przypadku prostego kanału, dla którego istnieje rozwiązanie analityczne, pokazują, że metoda kierunków naprzemiennych (ADI) pozwala w relatywnie krótkim czasie otrzymać wyniki zgodne z rozwiązaniem analitycznym. Metoda ta jest optymalną metodą różnic skończonych pod względem stabilności, dokładności i szybkości obliczeń do rozwiązywania dwuwymiarowego równania przenoszenia adwekcyjno-dyfuzyjnego. Szczegółowe analizy różnych schematów numerycznych i rezultaty w bardziej skomplikowanych przypadkach zostaną przedstawione wkrótce w oddzielnym opracowaniu.

Literatura

- CZERNUSZENKO W. 1990: Dispersion of pollutants in flowing surface water [in:] Encyclopedia of Fluid Mechanics. Vol. 10. Surface and Groundwater flow phenomena. Gulf Publishing Company, Houston, London, Paris.
- DAHLQUIST G., BJÖRCK A. 1983: Metody numeryczne. PWN, Warszawa.
- DOUGLAS J. 1955: On the numerical integration of $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{\partial u}{\partial t}$ by implicit methods. *J. Soc. Indust. Appl. Math.* 3, 1: 42–65.
- FLETCHER C.A.J. 1991: Computational techniques for fluid dynamics. Springer-Verlag, Berlin.
- KALINOWSKA M.B. 2003: Model mieszania się wód rzecznych na przykładzie Rudawy

- i Wisły. Praca magisterska. AGH, Wydział Fizyki i Techniki Jądrowej, Kraków.
- KALINOWSKA M.B., ROWIŃSKI P.M. 2004: Comparison of numerical schemes for two-dimensional mixing models for rivers. Hydraulic Problems in Environmental Engineering, XXIV International School of Hydraulics, Jastrzębia Góra.
- PEACEMAN D.W., RACHFORD H.H. 1955: The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations. *J. Soc. Indust. Appl. Math.* 3, 1: 28–42.
- RUTHERFORD J.C. 1994: River Mixing. Wiley, Chichester.
- SMITH R., YONGMING T. 2001: Optimal and near-optimal advection-diffusion finite difference schemes. VI. Proc. R. Soc. Lond. A, 457: 2379–2396.
- SZYMKIEWICZ R. 2000: Modelowanie matematyczne przepływów w rzekach i kanałach. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa.

Summary

Numerical solutions of two-dimensional mass transport equation in rivers. The transport processes in rivers in many cases can be represented by depth-

-averaged, two-dimensional advection-diffusion equation. The equation with general boundary and initial conditions does not have an exact analytical solution, and therefore problem requires numerical methods. It is important to choose an algorithm, which is accurate, stable and fast. The Alternating Direction Implicit method has been proposed to solve the problem. The scheme is stable and relatively fast. Tests in a simple canal for which the analytical solution is known, show that the scheme can give us an accurate solution comparing to the analytical one.

Author's address:

Monika Kalinowska
Zakład Zasobów Wodnych
Instytut Geofizyki, PAN
ul. Księcia Janusza 64, 01-452 Warszawa
Poland