

NUMERIČKO REŠAVANJE TRANSPORTNE JEDNAČINE SA PRIMENOM NA PODZEMNE VODE

Zoltan Horvat¹,
Miodrag Spasojević²

UDK: 519.6:502.51(26)

Rezime: U ovom radu je predstavljen linijski numerički model za transport zagađivača. Da bi se postigla potrebna tačnost jednačina je rešavana kombinacijom Holly-Preissmann-ove metode za advekciju i Crank-Nicholson-ove šeme metode konačnih razlika za difuziju. Upoređeni su rezultati rešavanja kompletne transportne jednačine dobijeni različitim metodama. Nakon toga jednačina je modifikovana za linijski transport zagađivača u podzemnoj vodi, koji je podložan biološkoj/hemijskoj razgradnji. Model je primenjen na primer transporta jona amonijuma NH_4^+ .

Ključne reči: Linijski transport zagađivača, numeričke metode, podzemna voda, biološka/hemijska razgradnja.

1. UVOD

Linijski transport zagađivača (koji obuhvata združeno dejstvo advekcije i difuzije) je opisan linearnom parcijalnom diferencijalnom jednačinom prvog reda koja ima i parabolične i hiperbolične karakteristike. U ovom radu su testirana i predstavljena dva numerička modela koji na različite načine rešavaju jednačinu. Nakon toga jednačina transporta je modifikovana za neustaljeni transport zagađivača u podzemnoj vodi koja struji u akviferu sa slobodnom površinom.

2. JEDNAČINA NEUSTALJENOG LINIJSKOG TRANSPORTA ZAGAĐIVAČA

Ako se napiše jednačina održanja mase zagađivača koji je pomešan sa vodom na molekularnom nivou, uz pretpostavku da je jedini mehanizam promene mase molekularna difuzija, dobija se jednačina transporta u kojoj figurišu trenutne vrednosti. Nakon osrednjavanja jednačine po *Reynolds*-u, dobija se jednačina neustaljenog transporta zagađivača [5]. Izostavljanjem dve prostorne koordinate konačno se dobija jednačina neustaljenog linijskog transporta zagađivača.

¹ Zoltan Horvat, dipl. grad. inž. – master, Građevinski fakultet Subotica, Kozaračka 2a, tel: 554 – 300, e – mail: horvatz@gf.uns.ac.rs

² Dr. Miodrag Spasojević, dipl.grad.inž., Građevinski fakultet Subotica, Kozaračka 2a, tel: 554 – 300, e – mail: mspasojevic@gf.uns.ac.rs

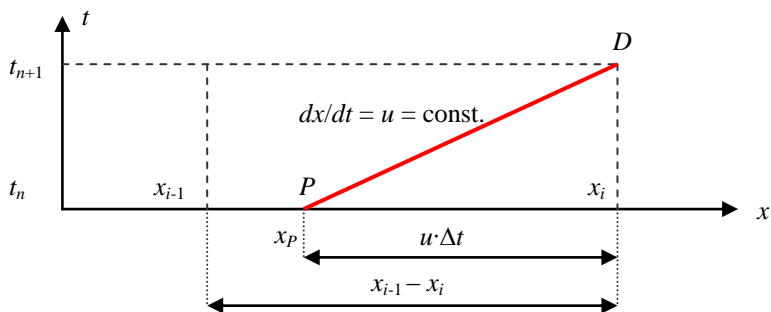
$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u \cdot C) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \right), \quad (1)$$

gde je C koncentracija zagađivača, u brzina strujanja fluida, a D_x koeficijent difuzije koji obuhvata i molekularnu i turbulentnu difuziju.

Međutim, jednostavnosti radi tokom testiranja numeričkih metoda za rešavanje jednačine (1) uzima se da su brzina strujanja i koeficijent difuzije konstante (2).

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2)$$

3. STRATEGIJA NUMERIČKOG REŠAVANJA JEDNAČINA



Slika 1. Šematski prikaz trajektorije fluidnog delića u ravni prostor-vreme.

U jednačini (2) drugi član sa leve strane se naziva advektivni član, a član na desnoj strani jednačine je difuzioni član. Ako se izostavi difuzioni član dobija se jednačina čiste advекcije, koja je numerički veoma osetljiva i rešava se primenom metode karakteristika.

Ako se trajektorija fluidnog delića definiše kao $dx/dt=u$ i ova diferencijalna jednačina uvrsti u jednačinu čiste advекcije, ona se svodi na materijalni izvod $DC/Dt=0$. Ovako se jednačina čiste advекcije svodi na dve obične diferencijalne jednačine što je osnovni princip metode karakteristika. Rešenje materijalnog izvoda se dobija integraljenjem po trajektoriji i svodi se na to da je $C_D=C_P$ (koncentracija u dolaznoj tački D = koncentracija u polaznoj tački P). Koordinata polazne tačke x_P se dobija integraljenjem jednačine trajektorije delića.

U opštem slučaju polazna tačka pada između diskretnih tačaka (slika 1), pa se problem svodi na problem interpolacije. Najbolje rezultate za C_P daje lokalna interpolacija višeg reda, što je osnovna ideja *Holly-Preissmann*-ove metode.

Difuzija je numerički benigna, pa se za difuzioni član primenjuje *Crank-Nicholson*-ova aproksimacija metode konačnih razlika.

4. HIBRIDNI METOD

Ovaj metod je predlog autora *Alexandre Preissmann* i *Forrest M. Holly*. Ako se trajektorija delića definiše kao $dx/dt=u$ (slika 1), leva strana jednačine (2) postaje materijalni izvod pa se parcijalna diferencijalna jednačina (2) svodi na

$$\frac{DC}{Dt} = D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \text{ što važi duž trajektorije } \frac{dx}{dt} = u. \quad (3)$$

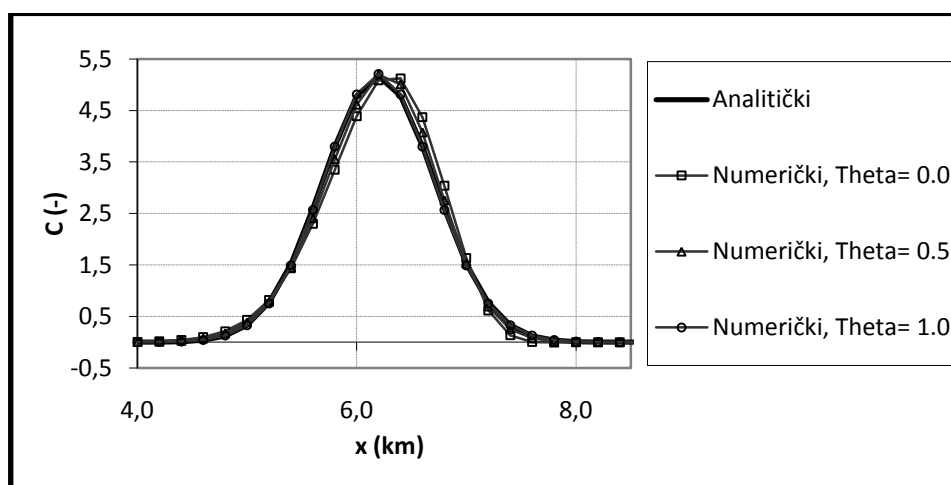
Integraljenjem gornje dve jednačine od polazne (x_p, t_n) do dolazne (x_b, t_{n+1}) tačke trajektorije dobijaju se dve algebarske jednačine. Ako se za integraljenje koristi trapezno pravilo dobija se izraz (4).

$$C_i^{n+1} - C_p^n = D_x \cdot \frac{1}{2} \cdot \left[\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)_i^{n+1} + \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)_p^n \right] \cdot \Delta t, \quad x_p = x_i - u \cdot \Delta t \quad (4)$$

Drugi izvod u tački (x_b, t_{n+1}) se bez problema može zameniti *Crank-Nicholson*-ovom aproksimacijom. Za drugi izvod u tački (x_p, t_n) se takođe koristi *Crank-Nicholson*-ova aproksimacija samo u tački (x_b, t_n) . Ovo je jedna od ključnih principa hibridne metode. Dakle, ako se koristi uopšteno trapezno pravilo dobija se jednačina (5).

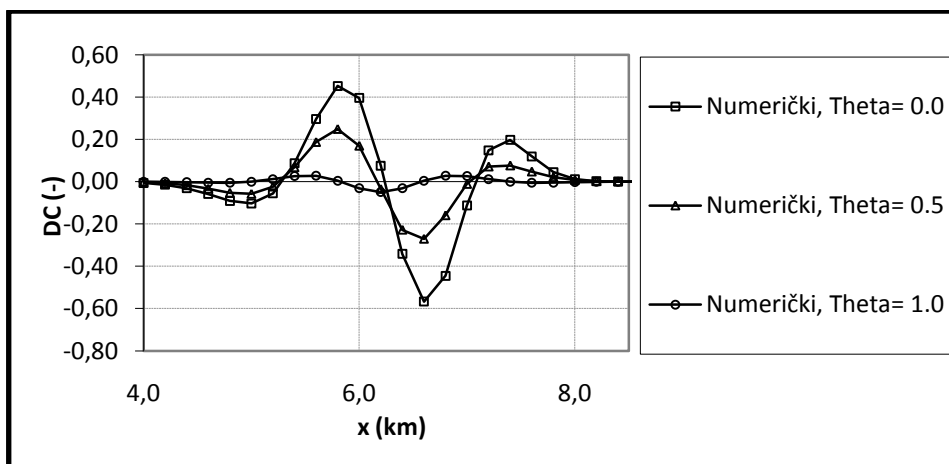
$$C_i^{n+1} = C_p^n + D_x \cdot \left[\theta \cdot \frac{C_{i+1}^{n+1} - 2 \cdot C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + (1-\theta) \cdot \frac{C_{i+1}^n - 2 \cdot C_i^n + C_{i-1}^n}{\Delta x^2} \right] \cdot \Delta t \quad (5)$$

$$x_p = x_i - u \cdot \Delta t$$



Slika 2 – Numrička simulacija transporta zagađivača koristeći hibridnu metodu.

Analiziraju se greške (slika 3), koje su date kao razlika između analitičkih i numeričkih vrednosti. Ako je $\theta = 0.0$, onda se daje veća težina izvodu u tački (x_p, t_n) , koji je smaknut u tačku (x_b, t_n) pa tako unosi numeričku grešku. Sa druge strane ako je $\theta = 1.0$, onda se daje veća težina izvodu u tački (x_b, t_{n+1}) , koji nije smaknut pa je tako numerička greška manja.



Slika 3 – Greška numeričkih rezultata koristeći hibridnu metodu

5. METODA ETAPNOG REŠAVANJA

Ako se na prvi izvod koncentracije po vremenu primeni aproksimacija prvog reda (tzv. *Euler*-ova aproksimacija), jednačina (2) se može razdvojiti na dve jednačine, koje se rešavaju u dva uzastopna koraka:

- advektivni korak: $(C_i^* - C_i^n) / \Delta t = -u \cdot \partial C / \partial x$,
- difuzioni korak: $(C_i^{n+1} - C_i^*) / \Delta t = D_x \cdot \partial^2 C / \partial x^2$.

Rezultat advektivnog koraka C_i^* se koristi u difuzionom koraku kao prethodni (poznati) vremenski trenutak.

Advektivni korak se rešava primenom *Holly-Preissmann*-ove metode.

$$\frac{DC}{Dt} = 0, \text{ što važi duž trajektorije } \frac{dx}{dt} = u \quad (6)$$

Integraljenjem gornje dve jednačine od polazne (x_p, t_n) do dolazne (x_b, t_{n+1}) tačke trajektorije dobijaju se dve algebarske jednačine.

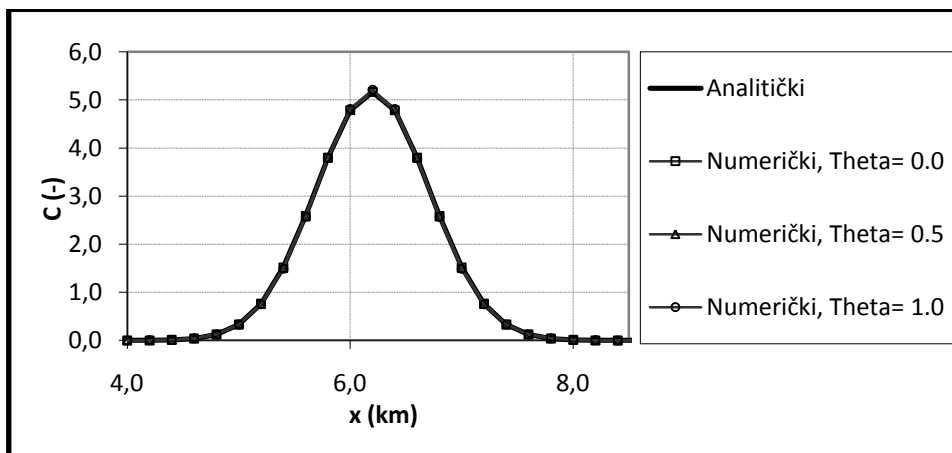
$$C_i^{n+1} = C_p^n, \quad x_p = x_i - u \cdot \Delta t \quad (7)$$

Difuzioni korak je numerički manje osetljiv, pa se rešava *Crank-Nicholson*-ovom šemom (8). Napominje se da je u jednačini (8) prethodni vremenski trenutak obeležen sa indeksom n zapravo rezultat advektivnog koraka.

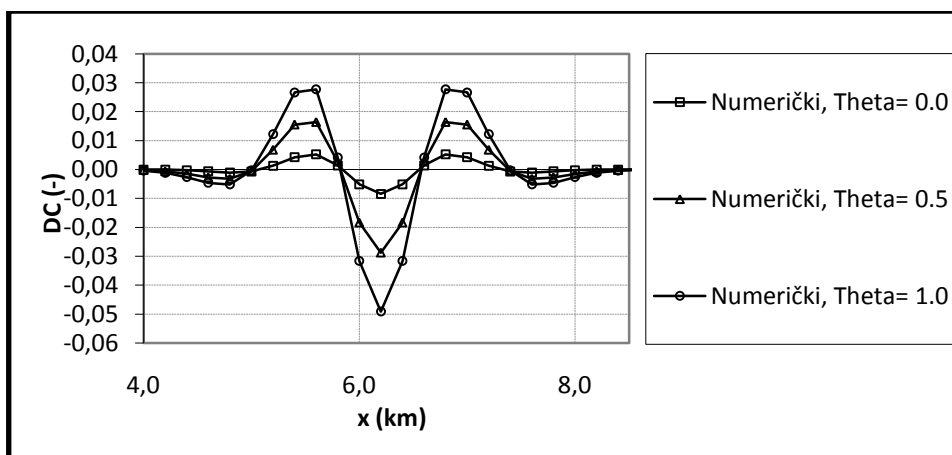
$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = D_x \cdot \theta \cdot \frac{C_{i+1}^{n+1} - 2 \cdot C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + D_x \cdot (1 - \theta) \cdot \frac{C_{i+1}^n - 2 \cdot C_i^n + C_{i-1}^n}{\Delta x^2}, \quad (8)$$

gde je θ koeficijent ponderacije po vremenu.

Na slici 5 su prikazane greške kao razlika između vrednosti proizteklih iz analitičkog i numeričkog rešenja.



Slika 4 – Numerička simulacija transporta zagađivača koristeći metodu etapnog rešavanja



Slika 5 – Greška numeričkih rezultata koristeći metodu etapnog rešavanja

6. JEDNAČINA NEUSTALJENOG LINIJSKOG TRANSPORTA ZAGAĐIVAČA U AKVIFERU SA SLOBODNOM POVRŠINOM

Navodi se jednačina neustaljenog linijskog transporta zagađivača u akviferu sa slobodnom površinom (9). Ako je materija koja se transportuje podložna biološkoj razgradnji (nekonzervativna materija) onda se u jednačini javlja član sa konstantom intenziteta degradacije prvog reda λ , a ako transportovana materija nije podložna biološkoj razgradnji (konzervativna materija) onda se pomenuti član izostavlja iz jednačine [3]. Jednačina (9) je rešavana metodom etapnog rešavanja.

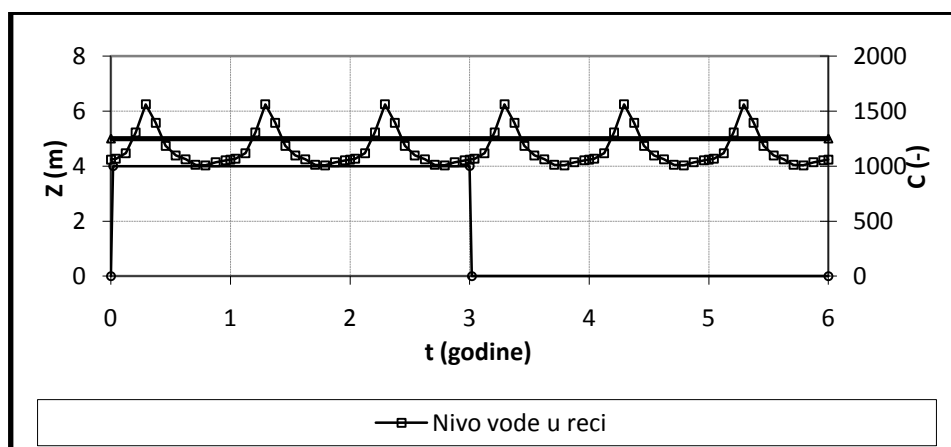
$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_{ef} \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{1}{H} \cdot \frac{\partial \left(H \cdot D_x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \right)}{\partial x} - \lambda \cdot C, \quad (9)$$

gde je v_{ef} efektivna brzina, H dubina vode, D_x koeficijent difuzije, λ konstanta intenziteta degradacije prvog reda.

Napominje se da u ovom slučaju koeficijent difuzije D_x sadrži u sebi molekularnu difuziju i hidrodinamičku disperziju [3]. Konstanta λ je u direktnoj vezi sa vremenom poluraspada $t_{0,5}$ preko jednačine (10).

$$\lambda = \ln(2)/t_{0,5} \quad (10)$$

Proučava se linijski transport jona amonijuma NH_4^+ , koji je podložan biološkoj degradaciji (nitrifikacija) [1]. Razmatrani proces se odvija u podzemnoj vodi koja struji između reke i kanala. Vodonepropusna podloga je horizontalna. Koeficijent filtracije porozne sredine je $K=0.0005$ m/s, a efektivna poroznost $e_p=0.32$ [2]. Koeficijent molekularne difuzije za jon amonijuma je $D_m=3.1047 \cdot 10^{-10}$ m²/s, a vreme poluraspada $t_{0,5}=5$ god. [4]. Granični uslovi su dati na slici 6, pri čemu se napominje da u reci nema zagađivača. U tabeli 1 su dati parametri numeričke simulacije.



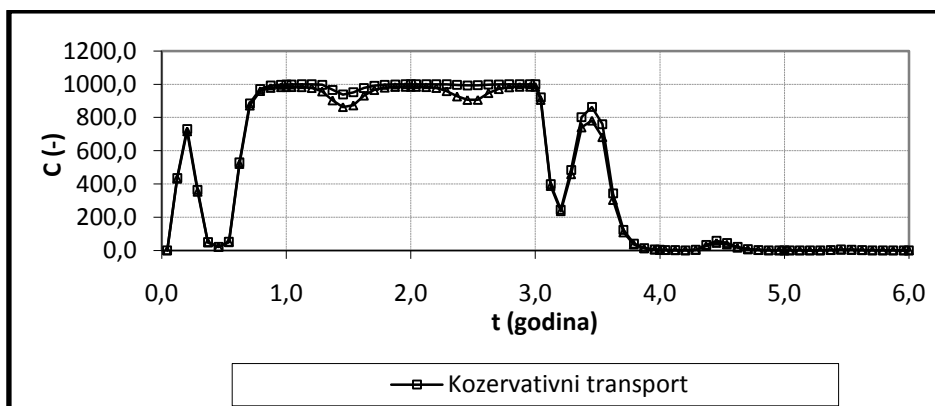
Slika 6 – Granični uslovi za numeričku simulaciju

Tabela 1 – Parametri numeričke simulacije

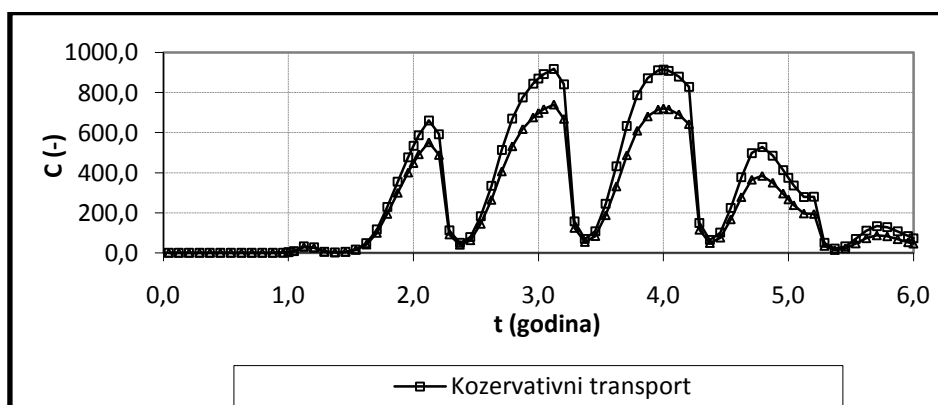
Opis	Oznaka	Vrednost	Jedinica mere
Period koji se simulira	T	6.0	godina
Računski korak po vremenu	Δt	50.0	s
Rastojanje između reke i kanala	L	200.0	m
Računski korak po prostoru	Δx	1.0	m
Koeficijent ponderacije	θ	0.5	-

Numerička simulacija je urađena za dva slučaja: kada ima odnosno kada nema biološke degradacije jona amonijuma.

U oba prikazana preseka smanjenje koncentracije u slučaju konzervativnog transporta ukazuje na povratno strujanje, dok u slučaju nekonzervativnog transporta predmetno smanjenje koncentracije ima dva razloga: povratno strujanje i/ili biološka degradacija.



Slika 7 – Dijagram promene koncentracije zagađivača na rastojanju 20.0m od kanala



Slika 8 – Dijagram promene koncentracije zagađivača na rastojanju 180.0m od kanala

7. ZAKLJUČAK

Kompletna jednačina transporta je rešavana pomoću hibridne metode i metode etapnog rešavanja. U pogledu tačnosti rezultati dobijeni hibridnom metodom zaostaju u odnosu na rezultate koje daje metoda etapnog rešavanja.

Na samom kraju su prikazani rezultati simulacija za jedan konkretan slučaj strujanja između reke i kanala, gde se jasno vidi uticaj biološke razgradnje, kao i hidraulički uticaj reke u ovom konkretnom slučaju.

LITERATURA

- [1] Benedek P., Literháthy P., *Vízminőség-szabályozás a környezetvédelemben*, Műszaki könyvkiadó, Budapest, 1979.
- [2] Brady M. M., Kunkel L. A., *A practical technique for quantifying drainage porosity*, PTS Laboratories.
- [3] Krešić N., Vujasinović S., Matić I., *Remedijacija podzemnih voda i geosredine*, Rudarsko geološki fakultet Univerziteta u Beogradu, Beograd, 2006.
- [4] Smith¹ R., Baumgartner¹ L. K., Miller¹ D. N., Repert¹ D.A. and Böhlke² J. K., *Assessment of nitrification potential in ground water using short term, single-well injection experiments*, (1) U.S. Geological Survey, 3215 Marine St., Boulder, CO, USA, (2) U.S. Geological Survey, 431 National Center, 12201 Sunrise Valley Drive, Reston, VA, USA, 2005.
- [5] Spasojević M., *Numerička hidraulika*, Pisana predavanja, Subotica, 1996.
- [6] www.epa.gov/athens/learn2model/part-two/onsite/longdisp.htm

NUMERICAL SOLUTION OF THE TRANSPORT EQUATION WITH APPLICATION ON GROUNDWATER FLOW

Summary: *This paper presents a one-dimensional numerical pollutant transport model. In order to achieve better accuracy the equation was solved using the Holly-Preissmann method for advection, and the Crank-Nicholson scheme for diffusion. The results gained by solving the complete transport equation using the different methods were analysed and compared. After that the equation was modified for one-dimensional pollutant transport in groundwater, where the pollutant is subject to biological/chemical degradation. The model was applied to an example using the ammonium ion NH_4^+ as the pollutant.*

Key words: *One-dimensional pollutant transport, numerical methods, groundwater, biological/chemical degradation.*