

Karel Kovářik *

NOVÉ NUMERICKÉ METÓDY PRE MATEMATICKÉ MODELOVANIE PRENOSU ZNEČISTENIA

THE NEW NUMERICAL METHODS FOR MATHEMATICAL MODELLING OF POLLUTANT TRANSPORT

Článok sa zaoberá riešením riadiacej rovnice prenosu v nasýtenej zóne pomocou metódy náhodnej prechádzky a metódy DR v spojení s metódou hraničných prvkov. Metóda hraničných prvkov dáva spojité pole rýchlostí ktoré sa používa pre riešenie rovnice prenosu v oboch metódach. Takéto modely môžu účinne simulovať problémy znečistenia podzemnej vody.

This paper deals with a solution of the transport governing equation in the saturated zone by the random-walk and DR method connected with the boundary element method. The boundary element's solution produces a continuous velocity field which is used to solve the transport equation by both methods. These models can be effectively used to simulate groundwater contamination problems.

Úvod

Modely prenosu sa začali používať ako účinný nástroj pre predpoveď prenosu znečistenia v podzemnej vode. Napriek tomu, že dodnes bol vyvinutý a publikovaný v literatúre celý rad numerických modelov, ani jeden nie je celkom bezchybný. Modely, ktoré priamo riešia rovnicu prenosu znečistenia, podliehajú numerickej disperzii alebo osciláciám, predovšetkým vtedy, keď je konvekčná zložka prenosu dominantná, t. j. pre vysoké Pecletove čísla. Tento problém sa môže riešiť pomocou časticových metód (Kinzelbach, 1988). Tieto časticové metódy sú síce veľmi užitočné, ale tiež majú niekoľko nevýhod, spojených hlavne s niektorými okrajovými podmienkami. Niektoré nové metódy pre priame riešenie tiež vyzerajú sľubne. Je to metóda dvojnej reciprocity (DR metóda) v spojení s metódou hraničných prvkov. Základná myšlienka metódy je detailne opísaná v (Partridge et al, 1992). Pôvodne bola táto metóda odvodená pre riešenie prenosu tepla v strojárstve, ale môže sa po niektorých úpravách veľmi jednoducho použiť aj pre prenos znečistenia.

Introduction

Transport models have been adopted as tools for the prediction of pollutant transport in groundwater. Although a number of numerical models have in recent years been developed and reported in the literature, none of them are flawless. Models that directly solved the equation of pollutant transport are subject to numerical dispersion or oscillations, particularly when the advective part of mass transport is dominant, i.e. for high Peclet's numbers. This problem can be solved using the particle-tracking methods (Kinzelbach, 1988). The particle tracking methods are very useful but they also have some disadvantages connected mainly with the specific boundary conditions. A new method of direct solution appeared and it shows promise. It is the dual-reciprocity method (DRM) connected with the boundary element method. The basic idea of this method has been described in detail (Partridge et al, 1992). This method has been developed to solve the thermal convection in mechanical engineering but it can also be very easily applied to the solution of the pollution transport.

Základné rovnice

Riadiaca rovnica prenosu látky je rovnica hydrodynamickej disperzie (pozrite tiež Bear, 1972)

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - v_j C \right) = R \frac{\partial C}{\partial t} \quad (1)$$

Basic equations

The governing equation of pollutant transport is the equation of hydrodynamic dispersion (see e.g. Bear, 1972)

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - v_j C \right) = R \frac{\partial C}{\partial t} \quad (1)$$

* Doc. Ing. Karel Kovářik, PhD.

Department of geotechnics, Faculty of Civil Engineering, University of Žilina, Moyzesova 20, SK-010 26 Žilina, Slovak Republic
Phone: +421-89-76 356 51-52, E-mail: kovarik@fstav.utc.sk

kde D_{ij} sú koeficienty hydrodynamickej disperzie, C je koncentrácia látky, v je pórová rýchlosť prúdenia a R je retardačný faktor (v prípade lineárnej sorpcie).

Pole rýchlostí sa môže vypočítať pomocou hydraulického modelu. Pre riešenie riadiacej diferenciálnej rovnice ustáleného prúdenia podzemnej vody v rovine (rov. 2) sa použila metóda hraničných prvkov.

Rovnica má tvar

$$T_x \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + T_y \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \sum_{k=1}^N Q_k = 0 \quad (2)$$

kde Φ je tlaková výška (potenciál prúdenia) a T_x, T_y sú koeficienty prietochnosti v smere x, y a Q je výdatnosť zdrojov v oblasti. Okrajové podmienky môžu byť

- Dirichletova podmienka $\Phi = \Phi_B$ na časti Γ_1 hranice,
- Neumanova podmienka $\partial\Phi/\partial\nu = q_B$ na časti Γ_2 hranice, kde ν je jednotkový vektor vonkajšej normály,
- Cauchyho podmienka $\partial\Phi/\partial\nu = f(\Phi)$ na časti Γ_3 hranice.

Riešenie rov. (2) metódou hraničných prvkov dáva Φ a $\partial\Phi/\partial\nu$ v prvkoch na hranici oblasti. Hodnoty pórovej rýchlosti v ľubovoľnom bode vo vnútri oblasti sa môžu vypočítať pomocou vzťahu

$$V_x = -\frac{K_x}{n_{ef}} \left[\sum_{j=1}^N q_j \int_{\Gamma_j} \frac{\partial\Phi^*}{\partial x} d\Gamma_j - \sum_{j=1}^N h_j \int_{\Gamma_j} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial\Phi^*}{\partial\nu} \right) d\Gamma_j + \sum_{k=1}^N \frac{Q_k}{T_x} \frac{\partial\Phi^*}{\partial x} \right] \quad (3)$$

kde K_x je súčiniteľ filtrácie, Φ^* je fundamentálne riešenie, n_{ef} je účinná pórovitosť a N je počet okrajových uzlov. Obdobná rovnica platí aj pre rýchlosť v smere osi y . Fundamentálne riešenie pre Laplaceovu rovnicu pre rovinnú úlohu môžeme písať v tvare

$$\Phi^* = \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{1}{r} \right) \quad (4)$$

Metóda náhodnej prechádzky

Pre riešenie rov. (1) použijeme teraz metódu náhodnej prechádzky. Základný predpoklad metódy spočíva v tom, že rozdelenie koncentrácie látky môže byť nahradené rozdelením konečného počtu častíc. Každá táto častica je nositeľkou určitého množstva látky, ktoré sa môže v čase meniť (napr. pôsobením rozpadu). Počet častíc musí byť dostatočne vysoký, aby metóda konvergovala k presnému riešeniu rov. (1). Mechanizmus prenosu pozostáva z dvoch častí, a to z konvektívnej a disperznej zložky.

where D_{ij} are the coefficients of hydrodynamical dispersion, C is the concentration of pollutant, v is the pore velocity and R is the retardation factor (in case of linear adsorption).

The velocity field of groundwater can be computed by a hydraulical model. The boundary element method has been used to solve the governing differential equation of two dimensional horizontal steady groundwater flow

$$T_x \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + T_y \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \sum_{k=1}^N Q_k = 0 \quad (2)$$

where Φ is the pressure head and T_x, T_y are the coefficients of transmissivity in the direction x, y and Q is discharge of wells inside the domain. The boundary conditions to this problems are of the following types

- the Dirichlet's condition $\Phi = \Phi_B$ on the Γ_1 part,
- the Neumann's condition $\partial\Phi/\partial\nu = q_B$ on the Γ_2 part of boundary, where ν is the normal outward unit vector,
- the Cauchy's condition $\partial\Phi/\partial\nu = f(\Phi)$ on the Γ_3 part of boundary.

Solution of the eq. (2) by the BEM gives the values of Φ and $\partial\Phi/\partial\nu$ along the boundary. Now the pore-water velocities distribution inside the domain can be computed as

where K_x is the coefficient of hydraulic conductivity, Φ^* is the fundamental solution, n_{ef} is the effective porosity and N is the number of boundary nodes. A similar equation is obtained for the velocities in the y -direction. The fundamental solution for the 2D steady flow can be written as

$$\Phi^* = \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{1}{r} \right) \quad (4)$$

Random-walk method

Now we use the random-walk method to solve eq.(1). The basic assumption of the random-walk model is that the distribution of the concentration of pollutants may be represented by a distribution of finite number of particles. A certain mass is assigned to each of these particles which may vary with time (e.g. decay). The number of particles must be sufficiently high to approximate the exact solution of the eq.(1). The mechanism of mass transport consists of two parts, the advective transport and

Konvektívny prenos sa simuluje pohybom častice v smere prúdenia podzemnej vody v danom bode, disperzná zložka je založená na posunutí podľa pravdepodobnostnej funkcie. Výsledkom tohto prístupu je normálne rozdelenie častíc. Štandardná odchýlka rozdelenia je

$$\sigma_L = \sqrt{2 \cdot D_L \cdot t} \quad \sigma_T = \sqrt{2 \cdot D_T \cdot t} \quad (5)$$

kde D_L, D_T sú koeficienty pozdĺžnej a priečnej disperzie. Nová poloha častíc sa potom môže určiť zo vzťahu (Kinzelbach, 1988)

$$x = x_0 + \Delta t \cdot V_x + \frac{V_x}{V} \cdot \lambda_1 \cdot \sigma_L + \frac{V_y}{V} \cdot \lambda_2 \cdot \sigma_T \quad (6)$$

$$y = y_0 + \Delta t \cdot V_y + \frac{V_y}{V} \cdot \lambda_1 \cdot \sigma_L + \frac{V_x}{V} \cdot \lambda_2 \cdot \sigma_T$$

kde V je veľkosť vektoru pórovej rýchlosti, λ_1, λ_2 sú náhodné čísla podľa normálneho rozdelenia s priemerom nula a štandardnou odchýlkou jedna a Δt je časový krok.

Pre výpočet rýchlosti pre každú časticu môžeme použiť rov. (3). Pomocou rov. (6) potom stanovíme novú polohu každej častice. Častice sú potom unášané prúdením podzemnej vody a celá skupina sa rozptyľuje disperzným pôsobením. Ak potrebujeme kvantifikovať výsledky modelu, môžeme vyniesť izolínie koncentrácie. Musíme použiť pomocnú sieť a spočítať množstvo častíc v jednotlivých blokoch siete. Pri tejto konštrukcii vzniká problém optimálnej veľkosti bloku siete. Ak je blok príliš veľký, zavádza sa v tomto okamihu do výsledkov určitá numerická disperzia, na druhej strane príliš malý rozmer bloku spôsobuje zvýraznenie štatistických odchýlok.

Pri použití tejto metódy vzniká tiež problém s okrajovou podmienkou 1. rádu (Dirichletova p.). Táto podmienka vyžaduje, aby sa do siete dostávali stále ďalšie a ďalšie častice v každom časovom kroku. Tak by táto podmienka viedla k veľmi vysokým počtom častíc. Preto sa často robí predpoklad, že sa nové častice vytvoria presne v mieste starých a pohybujú sa teda po rovnakej dráhe. Ak urobíme tento predpoklad, môžeme sčítať počet častíc v každom časovom kroku a simulovať tak túto okrajovú podmienku.

Metóda duálnej reciprocit

Pre riešenie rov. (1) môžeme teraz použiť aj metódu duálnej reciprocit (DRM). Najskôr použijeme transformáciu súradníc v tvare

$$\tilde{x} = x \quad \tilde{y} = y \cdot \sqrt{\Lambda} \quad \Lambda = \frac{D_x}{D_y} \quad (7)$$

Potom riadiaca rov. (1) sa môže písať v tvare

$$\frac{\partial^2 C}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial \tilde{y}^2} = \frac{v_x}{D_x} \cdot \frac{\partial C}{\partial \tilde{x}} + \frac{v_y}{D_x} \cdot \frac{\partial C}{\partial \tilde{y}} + \frac{R}{D_x} \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \quad (8)$$

the dispersion. The advective transport is simulated by moving the particles according to the velocity vector in given point. The dispersive transport is based on the probability distribution of displacements. The result of this estimation is a normal distribution. Standard deviations of the distribution are

$$\sigma_L = \sqrt{2 \cdot D_L \cdot t} \quad \sigma_T = \sqrt{2 \cdot D_T \cdot t} \quad (5)$$

where D_L, D_T are the coefficients of longitudinal and transverse dispersion, respectively. The new location of the particle is then given by (Kinzelbach, 1988)

$$x = x_0 + \Delta t \cdot V_x + \frac{V_x}{V} \cdot \lambda_1 \cdot \sigma_L + \frac{V_y}{V} \cdot \lambda_2 \cdot \sigma_T \quad (6)$$

$$y = y_0 + \Delta t \cdot V_y + \frac{V_y}{V} \cdot \lambda_1 \cdot \sigma_L + \frac{V_x}{V} \cdot \lambda_2 \cdot \sigma_T$$

where V is the average pore-water velocity, λ_1, λ_2 are normally distributed random variables with mean 0 and a standard deviation 1, and Δt is the time step.

The eq. (3) can be used to compute the velocity for each particle. This velocity may be used at each time step to calculate a new position of the particle. The cloud of particles is then moved according to groundwater flow and spread by the dispersion. If we need to quantify the results we could create the contours of concentration. Then the temporary net must be created and the number of particles in each cell of this net must be counted. There is a problem with the optimal size of these cells. If the cell's size is large numerical dispersion arises, on the other hand, the statistical errors occur if the size is too small.

There is also a problem with the boundary condition of the first kind (Dirichlet). This condition requires generating the new set of particles at each time step and it leads to a very large number of particles. Therefore, we suppose the new particles should create in the same place as the old ones. If we make this assumption, we can sum the number of particles at each time step and so we can simulate this boundary condition.

Dual reciprocity method

For the solution of eq.(1) we can now use the DRM. At first we use the following transformation of coordinates

$$\tilde{x} = x \quad \tilde{y} = y \cdot \sqrt{\Lambda} \quad \Lambda = \frac{D_x}{D_y} \quad (7)$$

Then the governing transport equation (1) can be written as

$$\frac{\partial^2 C}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial \tilde{y}^2} = \frac{v_x}{D_x} \cdot \frac{\partial C}{\partial \tilde{x}} + \frac{v_y}{D_x} \cdot \frac{\partial C}{\partial \tilde{y}} + \frac{R}{D_x} \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \quad (8)$$

Metóda duálnej reciprocity bola odvodená pre riešenie Poissonovej rovnice iba pomocou okrajových prvkov. Uvažujme rovnicu v tvare

$$\Delta C = b \quad (9)$$

Pravú stranu rov. (9) môžeme aproximovať v tvare

$$b = \sum_{i=1}^{N+L} \alpha_i \cdot f_i \quad (10)$$

kde N je počet uzlov na okraji oblasti a L je počet vnútorných bodov v riešenej oblasti. α_i je množina neznámych koeficientov a f_i sú aproximačné funkcie. Základná myšlienka DRM je použiť pre riešenie superpozíciu partikulárnych riešení riadiacej rovnice. Počet týchto riešení sa rovná celkovému počtu uzlov v oblasti. Môžeme písať

$$\Delta \hat{C}_i = f_i \quad (11)$$

kde \hat{C}_i je množina partikulárnych riešení rov. (9). Ak dosadíme rov. (11) do (10) a (9), dostaneme

$$\Delta C = \sum_{i=1}^{N+L} \alpha_i (\Delta \hat{C}_i) \quad (12)$$

Teraz môžeme použiť opäť riešenie obdobné metóde hraničných prvkov na rov. (12) (Patridge, 1992) a dostaneme

$$e_i \cdot C_i + \int_{\Gamma} \frac{\partial \Phi^*}{\partial \nu} C d\Gamma - \int_{\Gamma} \Phi^* \frac{\partial C}{\partial \nu} d\Gamma = \sum_{j=1}^{N+L} \alpha_j \left(e_j \cdot \hat{C}_j + \int_{\Gamma} \frac{\partial \Phi^*}{\partial \nu} \hat{C}_j d\Gamma - \int_{\Gamma} \Phi^* \frac{\partial \hat{C}_j}{\partial \nu} d\Gamma \right) \quad (13)$$

Množinu aproximačných funkcií f_i môžeme zvoliť napr. v tvare konečného radu

$$f_i = 1 + r_i + r_i^2 + r_i^3 + \dots + r_i^m \quad (14)$$

Potom množina partikulárnych riešení má tvar

$$\hat{C}_i = \sum_{k=0}^m \frac{r_i^{k+2}}{(k+2)^2} \quad (15)$$

a ich derivácia podľa vonkajšej normály sa môže vyjadriť ako

$$\frac{\partial \hat{C}_i}{\partial \nu} = \frac{\partial r_i}{\partial \nu} \cdot \sum_{k=0}^m \frac{r_i^k}{k+2} \quad (16)$$

Ak máme dané hodnoty b v rov. (10) v $N+L$ bodoch, môžeme stanoviť neznáme koeficienty α_j v rov. (13) ako

$$\alpha = F^{-1} \cdot b \quad (17)$$

The double reciprocity method has been used to derive a boundary-only solution of the Poisson's equation

$$\Delta C = b \quad (9)$$

The right side of eq.(9) can be approximated as

$$b = \sum_{i=1}^{N+L} \alpha_i \cdot f_i \quad (10)$$

where N is the number of boundary nodes and L is the number of internal nodes in the area of interest. The α_i are a set of initially unknown coefficients and the f_i are approximating functions. The basic idea of the DRM is a superposition of localized particular solutions of the governing equation. The number of these solutions are equal to the total number of nodes in the problem and we can write

$$\Delta \hat{C}_i = f_i \quad (11)$$

where \hat{C}_i is the set of particular solutions of eq. (9). If we substitute eq. (11) to (10) and (9) we get

$$\Delta C = \sum_{i=1}^{N+L} \alpha_i (\Delta \hat{C}_i) \quad (12)$$

Now we can apply the BEM solution of the eq.(12) (see Patridge, 1992) and we can write

The set of approximating functions f_i can be chosen e.g. as the series

$$f_i = 1 + r_i + r_i^2 + r_i^3 + \dots + r_i^m \quad (14)$$

Then the set of particular solutions has the following form

$$\hat{C}_i = \sum_{k=0}^m \frac{r_i^{k+2}}{(k+2)^2} \quad (15)$$

and the normal derivative can be written as

$$\frac{\partial \hat{C}_i}{\partial \nu} = \frac{\partial r_i}{\partial \nu} \cdot \sum_{k=0}^m \frac{r_i^k}{k+2} \quad (16)$$

If we have defined the values of b in eq.(10) in $N+L$ points, we can determine the unknown coefficients α_j in the eq. (13) as

$$\alpha = F^{-1} \cdot b \quad (17)$$

kde sme označili F^{-1} inverznú maticu k matici aproximačných funkcií f_{ij} . Ak použijeme maticové označenie, môžeme rov. (13) písať v tvare

$$H \cdot C - G \cdot Q = (H \cdot \hat{C} - G \cdot \hat{Q}) \cdot F^{-1} \cdot b \quad (18)$$

Pravá strana rov. (8) je súčet troch rôznych členov b_1 , b_2 a b_3 , kde

$$b_1 = \frac{V_x}{D_x} \frac{\partial C}{\partial \tilde{x}} \quad b_2 = \frac{V_y}{D_x} \frac{\partial C}{\partial \tilde{y}} \quad b_3 = \frac{R}{D_x} \frac{\partial C}{\partial t} \quad (19)$$

Teraz môžeme použiť rovnaký postup na konvektívne členy b_1 a b_2 . Rov. (17) môžeme teraz písať ako

$$\alpha_i = \frac{V_x}{D_x} \sum_{j=1}^{N+L} F_{ij}^{-1} \frac{\partial C}{\partial \tilde{x}} \quad (20)$$

a rov. (18) má tvar

$$H \cdot C - G \cdot Q = \frac{V_x}{D_x} (H \cdot \hat{C} - G \cdot \hat{Q}) \cdot F^{-1} \cdot \frac{\partial C}{\partial \tilde{x}} \quad (21)$$

Ak vyjadríme deriváciu C ako funkciu hodnôt C v uzloch (see Partridge, 1992) v tvare

$$\frac{\partial C}{\partial \tilde{x}} = \frac{\partial F}{\partial \tilde{x}} F^{-1} \cdot C \quad (22)$$

potom rov. (21) môžeme písať ako

$$(H - A) \cdot C - G \cdot Q = 0$$

kde sme označili

$$A = (H \cdot \hat{C} - G \cdot \hat{Q}) \cdot F^{-1} \cdot \frac{V_x}{D_x} \cdot \frac{\partial F}{\partial \tilde{x}} \cdot F^{-1} \quad (23)$$

Rovnaký postup použijeme na člen b_2 . Potom matica A sa môže vyjadriť ako

$$A = (H \cdot \hat{C} - G \cdot \hat{Q}) \cdot F^{-1} \left(\frac{V_x}{D_x} \cdot \frac{\partial F}{\partial \tilde{x}} + \frac{V_y}{D_x} \cdot \frac{\partial F}{\partial \tilde{y}} \right) \cdot F^{-1} \quad (24)$$

Keď aplikujeme DRM na posledný člen b_3 , rov. (23) bude mať nasledujúci tvar

$$(H - A) \cdot C - G \cdot Q = B \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \quad (25)$$

kde matica B je

$$B = \frac{R}{D_x} (H \cdot \hat{C} - G \cdot \hat{Q}) \cdot F^{-1} \quad (26)$$

where we denoted F^{-1} the inverse matrix to the matrix of the set of approximating functions f_{ij} . If we now use the matrix notation we can express the eq. (13) in the form

$$H \cdot C - G \cdot Q = (H \cdot \hat{C} - G \cdot \hat{Q}) \cdot F^{-1} \cdot b \quad (18)$$

The right side of eq. (8) is the sum of three different terms b_1 , b_2 and b_3 , where

$$b_1 = \frac{V_x}{D_x} \frac{\partial C}{\partial \tilde{x}} \quad b_2 = \frac{V_y}{D_x} \frac{\partial C}{\partial \tilde{y}} \quad b_3 = \frac{R}{D_x} \frac{\partial C}{\partial t} \quad (19)$$

Now we can apply the same procedure to the advective terms b_1 and b_2 . We can write eq.(17) as

$$\alpha_i = \frac{V_x}{D_x} \sum_{j=1}^{N+L} F_{ij}^{-1} \frac{\partial C}{\partial \tilde{x}} \quad (20)$$

and eq. (18) has the form

$$H \cdot C - G \cdot Q = \frac{V_x}{D_x} (H \cdot \hat{C} - G \cdot \hat{Q}) \cdot F^{-1} \cdot \frac{\partial C}{\partial \tilde{x}} \quad (21)$$

If we express the derivative of C as a function of values C at nodes (see Partridge, 1992) in the form

$$\frac{\partial C}{\partial \tilde{x}} = \frac{\partial F}{\partial \tilde{x}} F^{-1} \cdot C \quad (22)$$

then the eq.(21) can be written as

$$(H - A) \cdot C - G \cdot Q = 0$$

where matrix A is

$$A = (H \cdot \hat{C} - G \cdot \hat{Q}) \cdot F^{-1} \cdot \frac{V_x}{D_x} \cdot \frac{\partial F}{\partial \tilde{x}} \cdot F^{-1} \quad (23)$$

The same procedure will now be used in case of the term b_2 . Then the matrix A can be expressed as the sum of two terms b_1 and b_2

$$A = (H \cdot \hat{C} - G \cdot \hat{Q}) \cdot F^{-1} \left(\frac{V_x}{D_x} \cdot \frac{\partial F}{\partial \tilde{x}} + \frac{V_y}{D_x} \cdot \frac{\partial F}{\partial \tilde{y}} \right) \cdot F^{-1} \quad (24)$$

When we apply the DRM procedure to the last term b_3 , eq.(23) will have the following form

$$(H - A) \cdot C - G \cdot Q = B \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \quad (25)$$

where matrix B is

$$B = \frac{R}{D_x} (H \cdot \hat{C} - G \cdot \hat{Q}) \cdot F^{-1} \quad (26)$$

Rov. (25) je sústava lineárnych diferenciálnych rovníc, ktorú môžeme riešiť pomocou niektorej štandardnej schémy priamej integrácie. Najjednoduchšia je schéma dvoch po sebe nasledujúcich časových krokov. Zmenu C a Q v rozsahu každého časového kroku môžeme vyjadriť v tvare

$$\begin{aligned} C &= (1 - \Theta_c) \cdot C^i + \Theta_c \cdot C^{i+1} \\ Q &= (1 - \Theta_Q) \cdot Q^i + \Theta_Q \cdot Q^{i+1} \end{aligned} \quad (27)$$

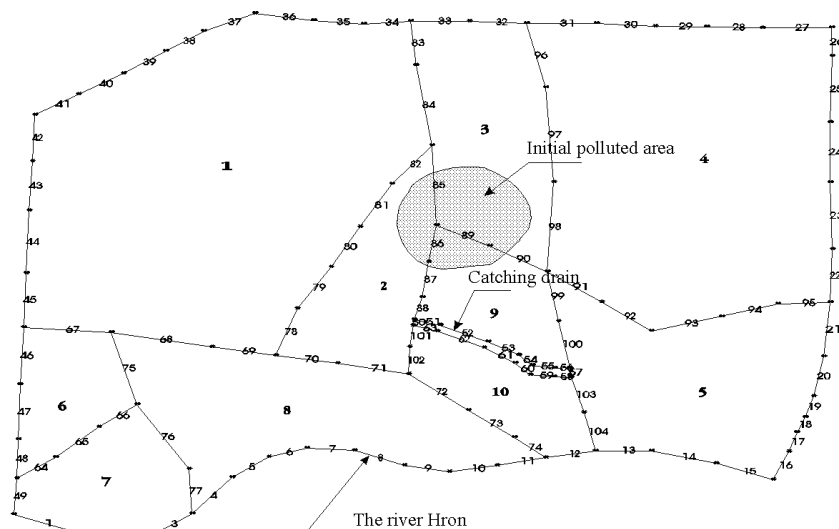
kde Θ_c a Θ_Q sú parametre, ktoré určujú polohu hodnôt C a Q medzi dvoma časovými krokmi i a $i+1$. Po dosadení rov.(27) do rov. (25) dostaneme

The eq. (25) is the set of linear differential equations which can be solved by any standard direct time-integration scheme. The simplest one is the two-level time integration scheme. The variation of C and Q within each time step can be expressed in the form

$$\begin{aligned} C &= (1 - \Theta_c) \cdot C^i + \Theta_c \cdot C^{i+1} \\ Q &= (1 - \Theta_Q) \cdot Q^i + \Theta_Q \cdot Q^{i+1} \end{aligned} \quad (27)$$

where Θ_c and Θ_Q are parameters which position the values C and Q between time intervals i and $i+1$. Substituting eq.(27) to eq.(25) yields

$$\left(\frac{1}{\Delta t} B + \Theta_c \cdot (H - A) \right) \cdot C^{i+1} - \Theta_Q \cdot G \cdot Q^{i+1} = \left(\frac{1}{\Delta t} B - (1 - \Theta_c) \cdot (H - A) \right) \cdot C^i + (1 + \Theta_Q) \cdot G \cdot Q^i \quad (28)$$



Obr. 1 Sieť hraničných prvkov
Fig. 1 The Boundary Element Net

Pravú stranu rov. (28) v okamihu $i+1$ poznáme a potom je rov. (28) sústava lineárnych rovníc, ktorú môžeme v každom časovom okamihu riešiť.

Príklad riešenia pomocou metódy náhodnej prechádzky

Príkladom je model sanácie podzemnej vody na lokalite bývalej vojenskej leteckej základne na strednom Slovensku. Na tejto lokalite je rozsiahle znečistenie, spôsobené rôznymi zdrojmi. Prevážne sa jedná o ropné látky, čiastočne plávajúce vo forme fázy na hladine podzemnej vody a čiastočne rozpustené. Pre ich zachy-

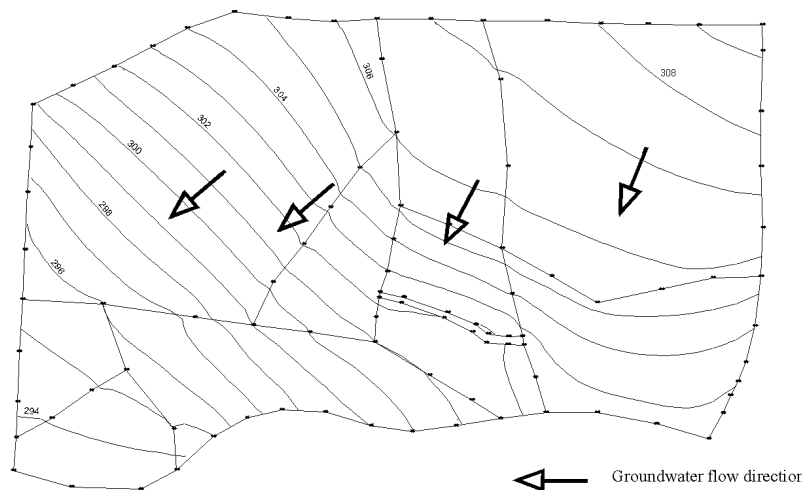
The right side of eq.(28) is known at time $i+1$ and the eq.(28) is the set of linear equations which can be solved at each time step.

Example of random-walk solution

As an example it is possible to present the model of a groundwater remediation of the former military airbase in central Slovakia. There is large pollution caused from different sources. There are mainly oil hydrocarbons, partly flowing on the groundwater level, partly soluted in the groundwater. Groups of

tenie a zároveň pre zabránenie priesaku do rieky Hron sa navrhla sústava infiltračných a záchytných drénov.

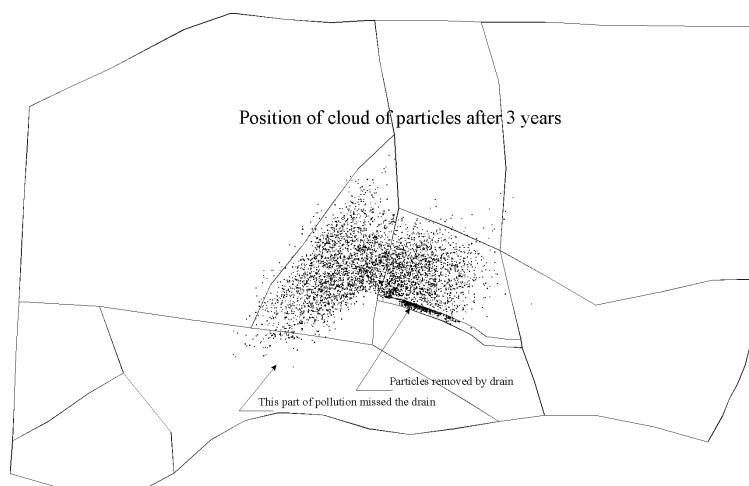
infiltration and catch drains have been suggested to protect the groundwater and also to prevent infiltration into the river Hron.



Obr. 2 Izolinie hladín podzemnej vody
Fig. 2 Contours of groundwater level

Cieľom modelovania bolo posúdenie správnosti funkcie navrhnutých drénov. Obr. 1 ukazuje sieť hraničných prvkov v prvej časti skúmanej oblasti, obr. 2 potom ukazuje izolínne vypočítanej úrovne hladiny. Znečistenie je prenášané podzemnou vodou z počiatočnej znečistenej oblasti (obr.1) do blízkosti záchytného drénu. Výsledky modelu ukazujú, že v tomto prípade sa znečistenie rozdelilo na dve hlavné časti. Prvá bola zachytená drénom, ale druhá pokračovala v prúde smerom do rieky Hron (obr. 3). Tento výsledok modelu potom bol premietnutý do zmeny projektu a umiestnenie drénov bolo zmenené tak, aby bolo zachytené celé znečistenie.

The aim of modeling has been to assess the right placement of these drains. Fig.1 shows the net of boundary elements in the first part of surveyed area, Fig.2 then shows contours of the computed groundwater level. The pollutant is transported by the groundwater from the initial area (see Fig.1) to the catch drain. Results of this mathematical model show that the pollution is divided into two main parts. The first part is caught by the drain, the other one flows toward the river Hron (see Fig.3). This result of the mathematical model has caused the change of the project and the placement of drains has been corrected to catch the whole pollution.



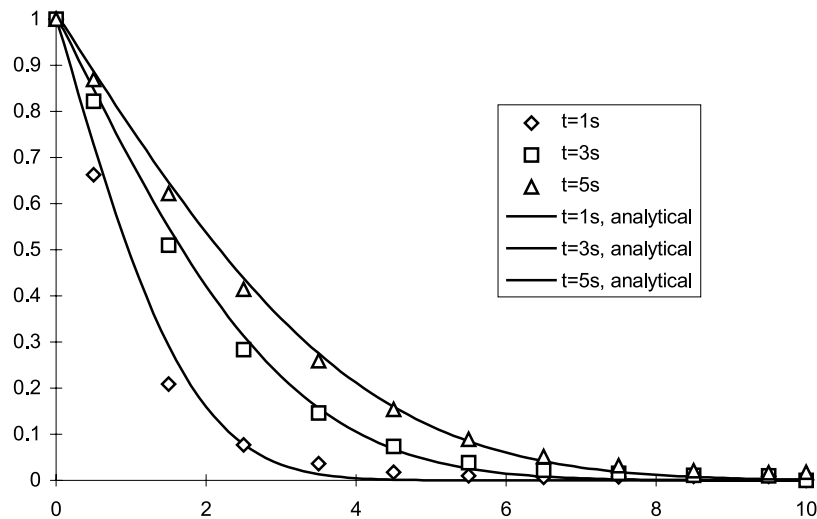
Obr. 3 Častice po 3 rokoch
Fig. 3 Cloud of particles after 3 years

Príklady DRM riešenia

Počítačový program DISDRM bol zostavený na základe už uvedených rovníc a pomocou tohto programu bolo vyriešených niekoľko príkladov. Tak ako všetky nové metódy, bola aj DRM najskôr testovaná na súbore jednoduchých vyriešených príkladov. Jedným z nich je jednorozmerný prípad hydrodynamickej disperzie, riešený bežne v literatúre (Bear, 1972). Tento problém bol riešený v oblasti v tvare obdĺžnika o rozmeroch 10 x 1 meter, ktorý bol rozdelený na 22 okrajových prvkov a mal 3 vnútorné body. Pre riešenie sa použilo 5 časových krokov o dĺžke $\Delta t = 1$ s. Výsledné hodnoty a ich porovnanie s analytickým riešením je na obr. 4.

Examples of DRM solution

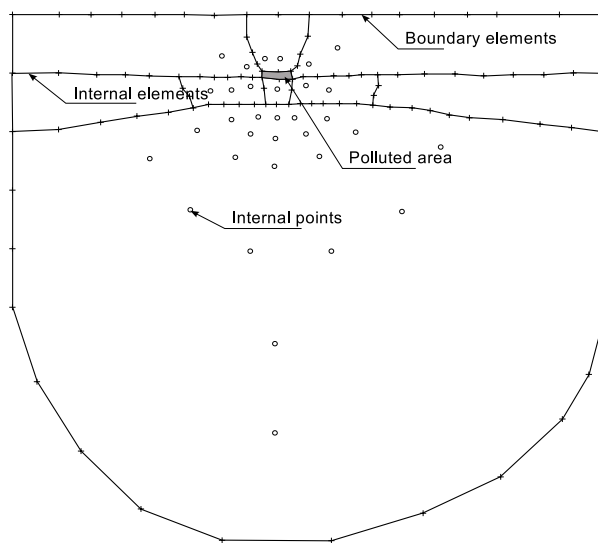
The computer program DISDRM has been prepared according to the aforementioned equations and some examples have been solved. Like any other new developed method the DRM is first tested on the set of well-known examples. One of them is the one-dimensional case of hydrodynamic dispersion (see e.g. Bear, 1972.). The problem has been solved on the strip area 10x1m, which has been divided to 22 boundary elements and 3 internal nodes. Only five time steps with $\Delta t = 1$ s has been used. The results and the comparison with analytical solution can be seen on Fig. 4.



Obr. 4 Priebeh koncentrácie v jednorozmernom modeli
Fig. 4 Variation of C along x-axis

Ďalší príklad je model prenosu znečistenia v podzemnej vode z čerpacej stanice pohonných hmôt na južnom Slovensku. Ide o šírenie sa rozpusteného znečistenia z jedného zdroja. Tento príklad je veľmi vhodný pre testovanie, pretože hydrogeologické pomery sú veľmi jednoduché. Obr. 5 ukazuje sieť prvkov, použitú pre riešenie tohto problému. Znečistená oblasť je vytvorená vnútornými prvkami a celá oblasť je rozdelená do niekoľkých zón.

Rýchlosť prúdenia podzemnej vody je $5,2 \cdot 10^{-8}$ m.s⁻¹, koeficienty disperzivity sú $a_L = 5$ m, $a_T = 1$ m, sorpcia bola v tomto riešení zanedbaná. Výsledky šírenia znečistenej vody sú na obr. 6 a 7 pre čas 10 a 20 rokov.



Obr. 5 DRM sieť
Fig. 5 DRM discretization

The other test example is a model of the groundwater pollution from the gas-filling station in south Slovakia. There is concentrated dissolved oil pollution from one source. It is a good test example because the hydrogeological properties are very simple. Fig. 5 shows the mesh used to solve this transport problem. The polluted area is created by internal elements and the whole area is divided into several zones.

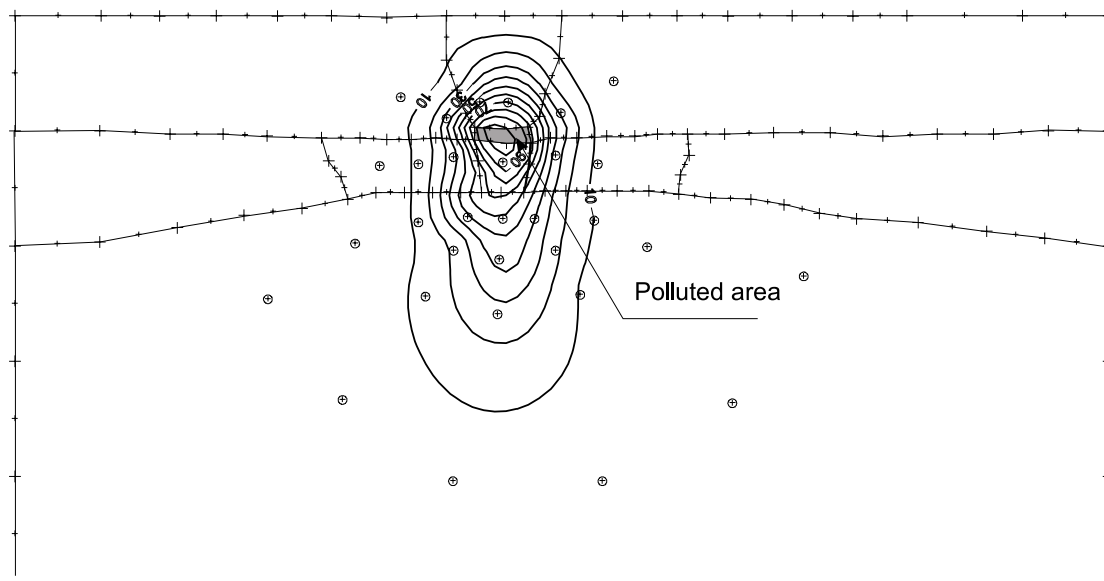
The velocity of the groundwater flow is $5,2 \cdot 10^{-8}$ m.s⁻¹, the dispersivity coefficients $a_L = 5$ m, $a_T = 1$ m, adsorption has been neglected. The results of spreading of the polluted water is on the Fig. 6 and Fig. 7 for the time 10 and 20 years respectively.

Závery

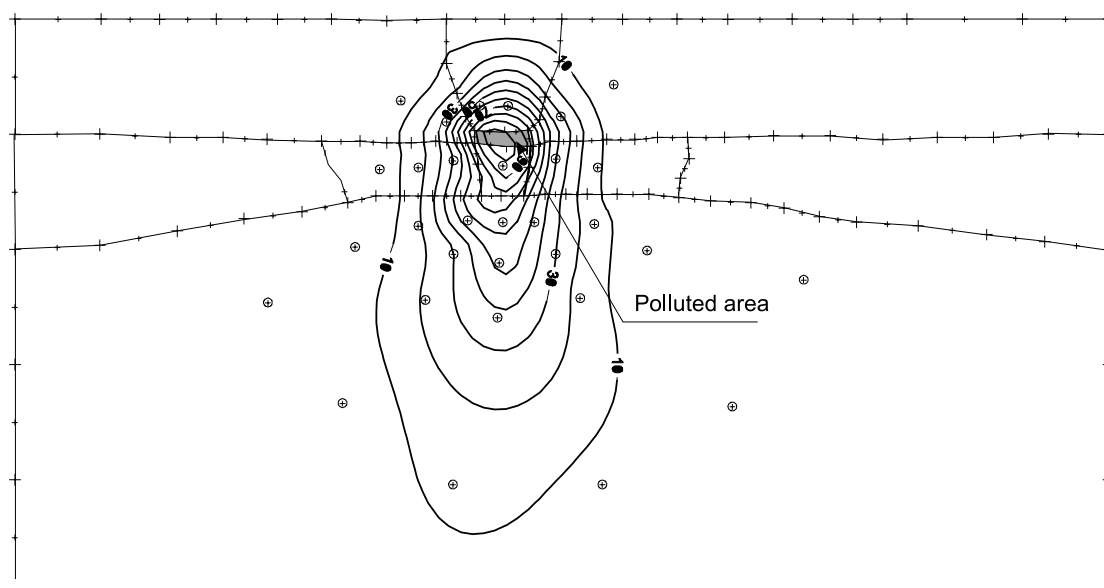
Časticové metódy pre riešenie transportu by mali byť vždy spojené s matematickým modelom prúdenia. Metóda hraničných prvkov je pre tento účel veľmi vhodná, pretože umožňuje výpočet rýchlostí prúdenia v ľubovoľnom bode oblasti. Iný spôsob vytvorenia numerického modelu transportného javu je spojenie metódy hraničných prvkov s DRM. Tento spôsob sa tiež ukazuje byť veľmi účinný pre riešenie disperznej rovnice. Metóda sa ukazuje byť veľmi stabilná a použité časové kroky môžu byť veľké a pritom

Conclusions

The particle tracking method should always be connected with the numerical model of the groundwater flow. The boundary elements method seems to be very feasible because the velocity of flow can be computed in an arbitrary point of the domain. The other way to prepare a numerical model of transport phenomena is the connection of the boundary elements and dual reciprocity method. It seems to be also very useful to solve the dispersion equation. This method seems to be very stable and the used time



Obr. 6 Izolínie pomernej koncentrácie po 10 rokoch
Fig. 6 Contours of concentration after 10 years



Obr. 7 Izolínie pomernej koncentrácie po 20 rokoch
Fig. 7 Contours of concentration after 20 years

nevnikajú žiadne oscilácie, zvyčajné u ostatných metód. Táto metóda môže byť v budúcnosti jednoducho doplnená aj o riešenie rádioaktívneho alebo chemického rozpadu spolu s niektorými druhmi sorpcie látky.

Recenzenti: I. Kazda, M. Slivovský

ste ps could be very large and no oscillations are reported. This method will also be developed in the future to solve problems of radioactive or chemical decay with some kinds of adsorption.

Reviewed by: I. Kazda, M. Slivovský

Literatúra - References

- [1] BEAR, J.: Dynamic of Fluid in Porous Media, Elsevier, New York,
- [2] BREBBIA, C. A., WALKER, J.: Boundary Element Techniques in Engineering, Newness - Butterworth, London, 1980,
- [3] KINZELBACH, W.: The Random Walk Method in Pollutant Transport Simulation, in E. Custodio(ed), Groundwater Flow and Quality Modelling, pp. 227-245, D. Reidel Publs. Co., 1988
- [4] PARTRIDGE, P. W., BREBBIA, C. A., WROBEL, L. C.: The Dual Reciprocity Boundary Element Method, CMP Southampton.

RIEŠENIE KRÍZOVÝCH SITUÁCIÍ 2000

Fakulta špeciálneho inžinierstva Žilinskej univerzity, v spolupráci s Ministerstvom hospodárstva Slovenskej republiky, organizuje v dňoch 24. - 25. mája 2000 V. medzinárodnú vedeckú konferenciu venovanú riešeniu krízových situácií v špecifickom prostredí.

Konferencia bude prebiehať v plenárnom zasadnutí a v troch sekciách:
 Sekcia č. 1: Riešenie krízových situácií verejnou správou,
 Sekcia č. 2: Informačné systémy v životnom prostredí,
 Sekcia č. 3: Využitie zdrojov hospodárskej mobilizácie v krízových situáciách.

Konferencia sa uskutoční v priestoroch Žilinskej univerzity.
 Všetkých záujemcov srdečne pozývame.

CRISES SITUATIONS SOLUTION 2000

The Faculty of Special Engineering of the University of Žilina in cooperation with the Ministry of Economy of the Slovak Republic is organising from 24 - 25 May 2000 the Fifth International Scientific Conference devoted to crises situations solution in specific environment.

The conference will take place in plenary meeting and in three sections:
 Section No. 1: Crises situations through public administrative authorities.
 Section No. 2: Information systems in life environment.
 Section No. 3: Utilisation of material mobilisation sources in crises situations.

The conference will be held in the area of the University of Žilina.
 All who are interested are cordially invited.

Sekretariát konferencie:

Žilinská univerzita - Fakulta špeciálneho inžinierstva

Secretary of the conference:

University of Žilina - Faculty of Special Engineering

RSDr. Ladislav Heršic, CSc.

Ul. 1.mája 32, B-27, SK-01001 Žilina, SLOVAKIA, Tel.: ++421-89-7633320, ex. 240, Fax: ++421-89-7234972, E-mail: vf@fsi.utc.sk