WISB356, Utrecht, 21 september 2012

Scientific Computing

Gerard Sleijpen
Rob Bisseling
Alessandro Sbrizzi

Universiteit Utrecht
Department of Mathematics

http://www.staff.science.uu.nl/∼sleij101/

WISB356, Utrecht, 21 september 2012

Grondwaterstroming

Gerard Sleijpen

Universiteit Utrecht
Department of Mathematics

http://www.staff.science.uu.nl/∼sleij101/

Programma

- Inleiding
- De druk van het grondwater
- De stroming van het grondwater
- Wet van behoud van massa
- Randvoorwaarden
- Verspreiding van een verontreiniging:
  - diffusie
  - advectie
- ◦ Absorptie en bacteriële verontreiniging
- ◦ Modelleren is vereenvoudigen

Numerieke simulatie

Modelleren is vereenvoudigen.

Wij vereenvoudigen extra

1) ter vermijding van routinematig extra programmeerwerk
2) maar met (zoveel mogelijke) behoud van principes

Voorbeeld.
2-d, rechte rivieren, rechthoekige gebieden, . . .

De druk van het grondwater

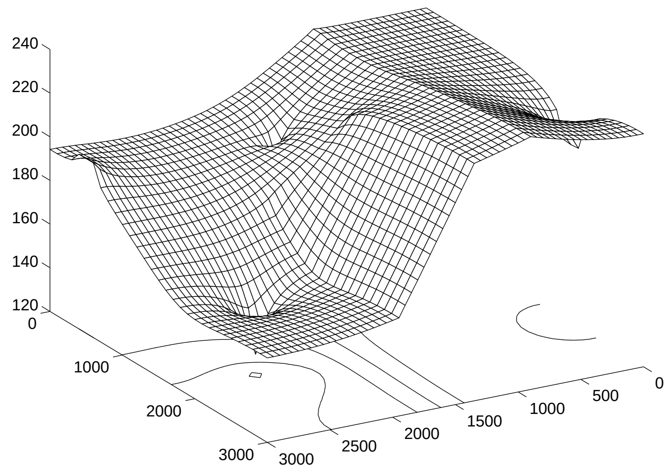
In een zeker gebied zijn we geïnteresseerd in
de **druk** $\phi(x, y, z)$ **van het grondwater**.

Aanname. De situatie is stationair (tijdsonafhankelijk).

De druk wordt gemeten in meters (m).

Voor de plaats gebruiken we
het **Cartesisch coördinaten systeem** waarbij:

x is een coördinaat in de oost-west richting,
y in de noord-zuid richting en
z in de diepte.
Alle grootheden in meters.
Het punt $(0, 0, 0)$ ligt in de top-zuid-west (in feite: west-zuid-top) hoek van ons gebied.



De stroming van het grondwater

In een zeker gebied zijn we geïnteresseerd in
de **druk** $\phi(x, y, z)$ **van het grondwater**.

Aanname. De situatie is stationair (tijdsonafhankelijk).

Druk verschil leidt tot stroming:
water stroomt van hoge druk naar lage druk:

$$-\text{grad}\,\phi(x,y,z) = -\nabla\phi(x,y,z) \equiv -\begin{bmatrix} \frac{\partial\phi}{\partial x}(x,y,z) \\ \frac{\partial\phi}{\partial y}(x,y,z) \\ \frac{\partial\phi}{\partial z}(x,y,z) \end{bmatrix}$$

Grootte van de stroming hangt af van de grondsoort:

$$\vec{u}(x,y,z) \equiv -a(x,y,z)\nabla\phi(x,y,z)$$

met a positief reëel waardig:
a is de **doorlaadbaarheidscoëfficiënt**.

De stroming van het grondwater

In een zeker gebied zijn we geïnteresseerd in
de **druk** $\phi(x, y, z)$ **van het grondwater**.

Aanname. De situatie is stationair (tijdsonafhankelijk).

Druk verschil leidt tot stroming:
water stroomt van hoge druk naar lage druk:

$$-\text{grad}\,\phi(x,y,z) = -\nabla\phi(x,y,z) \equiv -\begin{bmatrix} \frac{\partial\phi}{\partial x}(x,y,z) \\ \frac{\partial\phi}{\partial y}(x,y,z) \\ \frac{\partial\phi}{\partial z}(x,y,z) \end{bmatrix}$$

Grootte van de stroming hangt af van de grondsoort:

$$\vec{u}(x,y,z) \equiv -a(x,y,z)\nabla\phi(x,y,z)$$

met a positief reëel waardig: $a = a(x,y,z)$ in $\text{m}^3/\text{dag}\,\text{m}^2\,\text{m}$.
De **snelheid** $\vec{u}$ van de **grondwaterstroming** is in $\text{m}^3/\text{dag}\,\text{m}^2$

De stroming van het grondwater

In een zeker gebied zijn we geïnteresseerd in
de **druk** $\phi(x,y,z)$ **van het grondwater**.

Aanname. De situatie is stationair (tijdsonafhankelijk).

Druk verschil leidt tot stroming:
water stroomt van hoge druk naar lage druk:

$$-\text{grad}\,\phi(x,y,z) = -\nabla\phi(x,y,z) \equiv -\begin{bmatrix} \frac{\partial\phi}{\partial x}(x,y,z) \\ \frac{\partial\phi}{\partial y}(x,y,z) \\ \frac{\partial\phi}{\partial z}(x,y,z) \end{bmatrix}$$

De **stroomsnelheid** $\vec{u}$ hangt af van
het drukverschil en de grondsoort:

$$\vec{U}(x,y,z) \equiv -K(x,y,z)\nabla\phi(x,y,z)$$

met K symmetrisch 3×3 matrix waardig, plaats afhank..

De stroming van het grondwater

In twee dimensies (2-d)

$$\vec{U}(x,y) = \begin{bmatrix} u(x,y) \\ v(x,y) \end{bmatrix} = -K(x,y)\nabla\phi(x,y) = -K(x,y)\begin{bmatrix} \frac{\partial\phi}{\partial x}(x,y) \\ \frac{\partial\phi}{\partial y}(x,y) \end{bmatrix}.$$

In een dimensie (1-d)

$$\vec{U}(x) = u(x) = -K(x)\nabla\phi(x) = -K(x)\frac{\partial\phi}{\partial x}(x).$$

Wet van behoud van massa

Om een vergelijking te krijgen voor de druk ϕ van het grondwater gebruiken we de **Wet van behoud van massa**:

Wet. De hoeveelheid water die door de randen **uit** een zeker volume grond stroomt is gelijk aan de hoeveelheid water die door de randen er **in**stroomt plus de hoeveelheid water die er in dat volume rechtstreeks bijkomt of uitgaat.

Om de tekeningen overzichtelijk te houden voeren we de afleiding 2 dimensionaal uit (alleen in de oost-west richting en de noord-zuid richting).

Samenvatting. In Δt dag stroomt

$$\Delta t \int_{\Gamma_{\text{west}}} (\vec{U}(x,y,z), \vec{n}(x,y,z))\ \ \mathrm{d}_O(y,z) \qquad (*)$$

water door het stukje westelijke oppervlak Γ_{west}.

Hierbij is

- $\vec{U}(x,y,z)$ de stroomsnelheid in het punt (x,y,z) van Γ_{west},
- $\vec{n}(x,y,z)$ de **normaal vector** in (x,y,z) op Γ_{west}, d.w.z., de vector ter lengte 1 die loodrecht op Γ_{west} staat in de richting waarin de instroom gemeten moet worden (als $\vec{n}$ naar het oosten wijst en $(*)$ heeft bv. een negatieve waarde, dan stroomt het water naar westen).
- $(\cdot,\cdot)$ het standaard inproduct.

Als Γ_{west} een klein oppervlakte is van Δx bij Δz meter, dan is $(*)$ ongeveer gelijk aan $u(x-\frac{1}{2}\Delta x, y, z)\Delta t \Delta y \Delta z$.

Wet van behoud van massa

Als in het gebiedje alleen water inkomt of uitgaat door stroming door de rand (dus geen pomp, geen rivier, geen regenbui) dan geldt in 2-d

$$u(x - \tfrac{1}{2}\Delta x, y)\Delta t \Delta y - u(x + \tfrac{1}{2}\Delta x, y)\Delta t \Delta y \\ + v(x, y - \tfrac{1}{2}\Delta y)\Delta t \Delta x - v(x, y + \tfrac{1}{2}\Delta y)\Delta t \Delta x = 0.$$

Delen we door $\Delta t\, \Delta x\, \Delta y$, dan zien we dat

$$\tfrac{1}{\Delta x}[u(x - \tfrac{1}{2}\Delta x, y) - u(x + \tfrac{1}{2}\Delta x, y)] \\ + \tfrac{1}{\Delta y}[v(x, y - \tfrac{1}{2}\Delta y) - v(x, y + \tfrac{1}{2}\Delta y)] = 0$$

Nemen we de limiet $\Delta x \to 0$ en $\Delta y \to 0$, dan

$$-\mathrm{div}\, \vec{U} \equiv -\nabla \bullet \vec{U} \equiv -\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

Wet van behoud van massa

Als in een omgeving van een punt alleen water inkomt of uitgaat door stroming door de rand (dus geen pomp, geen rivier, geen regenbui) dan geldt in dat punt

$$-\mathrm{div}\, \vec{U} \equiv -\nabla \bullet \vec{U} \equiv -\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \qquad (+)$$

Stelling. Onder bovenstaand aanname

$$\nabla \bullet (K \nabla \phi) = 0 \qquad (*)$$

Een vectorveld $\vec{U}$ waarvoor $(+)$ geldt op een gebied is **divergentie vrij** op dat gebied.

Het snelheidsveld van de grondwaterstroming is dus divergentie vrij op een gebied als er in dat gebied alleen water bij komt of af gaat door stroming door de rand.

Randvoorwaarden

D is een gebied met rand $\Gamma = \partial D$.
In een punt $(x, y, z) \in \Gamma$ geldt

- de **essentiële** of **Dirichlet** randvoorwaarde als

$$\phi(x, y, z) = \phi_0(x, y, z)$$

- de **natuurlijke** of **Neumann** randvoorwaarde als

$$(-K\nabla\phi) \bullet \vec{n} = \chi_0$$

- de **gemengde** of **Robin** randvoorwaarde als

$$\alpha(-K\nabla\phi) \bullet \vec{n} = \gamma(\phi - \chi_0)$$

Stelling. Als op D $(*)$ geldt en in ieder punt van Γ een van bovenstaande randvoorwaarden en in minstens een punt geldt een Dirichlet randvoorwaarde dan is de oplossing ϕ uniek.

Verspreiding van gif

Laat in een punt (x, y, z) van het gebied D

$$\psi(x, y, z)$$

de **concentratie** van 'n zeker gif voorstellen (gemeten in gram per m^3 grondwater), waarvan we de verspreiding willen modelleren.

We nemen weer aan dat de ψ tijdsonafhankelijk is: we beschouwen de stationaire situatie.

Het gif verspreidt zich om twee redenen: door

- **diffusie** en
- **advectie**
  (meegenomen worden door de grondwater stroming).

Diffusie

We nemen eerst aan dat het grondwater ‘stil staat’ (niet stroomt: $-\nabla\phi = 0$ op D).

Het gif verspreidt zich dan doordat ieder molecuul beweegt volgens de standaard thermische dynamiek.

De snelheid waarmee het gif zich door diffusie verspreidt kan beschreven worden door het vectorveld

$$-\widetilde{K}\nabla\psi,$$

waarbij $\widetilde{K}$ een evenredigheids constante is die afhangt van de grondsoort.

Advectie

Het gif wordt ook meegenomen door het grondwater dat stroomt met een snelheid $\vec{U} = -K\nabla\phi$.
Dit effect heet **advectie** of, in andere toepassingen, **convectie**.

Als er geen diffusie is dan wordt de snelheid waarmee de concentratie van het gif verandert beschreven door

$$\psi\vec{U}$$

Advectie-diffusie vergelijking

Als er in de buurt van een punt (x, y, z) in het gebied D de concentratie gif alleen verandert door diffusie en advectie dan geldt in dat punt

$$-\nabla \bullet (-\widetilde{K}\nabla\psi + \psi\vec{U}) = 0$$

Stelling. De vergelijking heeft een unieke oplossing als in ieder punt op de rand Γ van D een Dirichlet, Neumann of Robin randvoorwaarde geldt en in minstens een punt een Dirichlet randvoorwaarde.

Absorptie

Vaak wordt het gif in de loop der tijd afgebroken. De vermindering van de concentratie gif door afbraak is evenredig met die concentratie. De evenredigheidsconstante c is weer grondsoort (dus plaats) afhankelijk ($c > 0$).

$$-\nabla \bullet (-\widetilde{K}\nabla\psi + \psi\vec{U}) - c\psi = 0$$

Opgave. We hebben $c > 0$ verondersteld.
$c < 0$ heeft ook een zinnige interpretatie. Welke?

Modelleren is vereenvoudigen

In de praktijk

1) zal de zwaartekracht verwerkt moeten worden

2) hangen de doorlaadbaarheidscoëfficiënten af van de druk:

$$a = a(x, y, z, \phi(x, y, z))$$

3) kan grond water vasthouden (absorberen).

4) is het probleem niet stationair door regenbuien, wisselende waterstanden in rivieren, etc..

...

WISB356, Utrecht, 21 september 2012

Discretiseer Grondwatervergelijkingen

Gerard Sleijpen

Universiteit Utrecht
Department of Mathematics

http://www.staff.science.uu.nl/~sleij101/

Programma

- Het model
- Symmetrische eindige differenties
- Discreet Domein
- Gediscretiseerde differentiaal vergelijking
- Gediscretiseerde randvoorwaarden
- Twee dimensionaal model
- ○ Randdiscretisatie voor een verschoven rooster
- ○ Andere discretisaties

Het model

We gebruiken het volgende model.

Op $D = [0, X] \times [0, Y]$ geldt

$$-\frac{\partial}{\partial x}(a\frac{\partial}{\partial x}\psi) - \frac{\partial}{\partial y}(b\frac{\partial}{\partial y}\psi) + \frac{\partial}{\partial x}(\psi\, u) + \frac{\partial}{\partial y}(\psi\, v) + c\psi = f$$

Hierbij zijn a, b (doorlaadbaarheidscoëfficiënten), u, v (stromingsveld in x- en y-richting) c (absorptie coëfficiënt) en f (bron term, regenbui) bekende functies en moeten we ψ bepalen.

Met randvoorwaarden

$$(-K\nabla\psi, \vec{n}) = \nu(\psi - \psi_0)$$

waarbij op ieder punt (x, y) op de rand $\Gamma = \partial D$ van D, $\vec{n}(x, y)$ de naar **buiten** gerichte normaal vector is en $\nu(x, y)$ en $\psi_0(x, y)$ bekende waarden hebben.

Het model

Op de transparanten leiden we de formules af voor

- **het 1-d model**. Op $D = [0, X]$ geldt

$$-\frac{\partial}{\partial x}(a\frac{\partial}{\partial x}\psi) + \frac{\partial}{\partial x}(\psi\, u) + c\psi = f$$

Met op de westrand de randvoorwaarde

$$a(0)\frac{\partial}{\partial x}\psi(0) = \nu_{\text{west}}[\psi(0) - \psi_{\text{west}}]$$

en op de oostrand

$$-a(X)\frac{\partial}{\partial x}\psi(X) = \nu_{\text{oost}}[\psi(X) - \psi_{\text{oost}}]$$

Opgave. Stel telkens na iedere 1-d afleiding, de 2-d (en 3-d) variant op.

Symmetrische eindige differenties

Beschouw een functie g op $D \equiv [0, X]$.

Voor $h > 0$ en $x \in [h, X-h]$ benaderen we $\frac{\partial g}{\partial x}(x)$ door

$$\frac{\partial}{\partial x}g(x) \approx \frac{1}{2h}\,[g(x+h) - g(x-h)]$$

Toepassingen. Kies $n_x \in \mathbb{N}$ en $h_x \equiv X/(n_x+1)$.

Schrijf $x_i \equiv i\,h_x$ en $g_i \equiv g(x_i) = g(i\,h_x)$

voor $i \in \{\frac{1}{2}k \mid k \in \mathbb{Z},\ 0 \leq \frac{1}{2}k\,h_x \leq X\}$

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(a\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)(x_i) + \frac{\partial}{\partial x}(\psi\,u)(x_i) + (c\,\psi)(x_i)$$

$$\approx \alpha_i^{\text{west}}\,\psi_{i-1} + \alpha_i^{\text{centraal}}\psi_i + \alpha_i^{\text{oost}}\,\psi_{i+1}$$

met

$$\alpha_i^{\text{west}} \equiv \frac{-a_{i-\frac{1}{2}}}{h_x^2} - \frac{u_{i-1}}{2h_x}, \quad \alpha_i^{\text{centraal}} \equiv \frac{a_{i-\frac{1}{2}} + a_{i+\frac{1}{2}}}{h_x^2} + c_i, \quad \alpha_i^{\text{oost}} \equiv \frac{-a_{i+\frac{1}{2}}}{h_x^2} + \frac{u_{i+1}}{2h_x}$$

Symmetrische eindige differenties

Beschouw een functie g op $D \equiv [0, X]$.

Voor $h > 0$ en $x \in [h, X-h]$ benaderen we $\frac{\partial g}{\partial x}(x)$ door

$$\frac{\partial}{\partial x}g(x) \approx \frac{1}{2h}\,[g(x+h) - g(x-h)]$$

Opmerkingen. $\alpha_i^{\text{west}}\,\psi_{i-1} + \alpha_i^{\text{cent}}\psi_i + \alpha_i^{\text{oost}}\,\psi_{i+1} = f_i$.

- Deze vergelijking volgt uit de **differentiaal vergelijking** en is gedefinieerd voor $i = 1, 2, \ldots, n_x$. (Waarom?) Voor $i = 0$ is ψ_{i-1} een functiewaarde buiten het gebied! We hebben dus n_x vergelijkingen met $n_x + 2$ onbekenden. De 2 'extra' vergelijkingen komen van de **randvoorwaarden**
- De oplossing ψ_i benadert ψ in het punt $x_i = i\,h_x$.
- a is op het hele gebied $[0, X]$ bekend. In het bijzonder is $a_{i+\frac{1}{2}} = a((i+\frac{1}{2})h_x)$ bekend.

Symmetrische eindige differenties

Beschouw een functie g op $D \equiv [0, X]$.

Voor $h > 0$ en $x \in [h, X-h]$ benaderen we $\frac{\partial g}{\partial x}(x)$ door

$$\frac{\partial}{\partial x}g(x) \approx \frac{1}{2h}\,[g(x+h) - g(x-h)]$$

Opmerkingen. $\alpha_i^{\text{west}}\,\psi_{i-1} + \alpha_i^{\text{cent}}\psi_i + \alpha_i^{\text{oost}}\,\psi_{i+1} = f_i$.

Randvoorwaarde. $a(0)\frac{\partial\psi}{\partial x}(0) = \nu_{\text{west}}\,(\psi(0) - \psi_{\text{west}})$.

Discretiseer: $\nu_{\text{west}}(\psi_0 - \psi_{\text{west}}) = a(0)\frac{\partial\psi}{\partial x}(0) \approx$

$$a(0)\frac{\psi(h_x) - \psi(0)}{h_x} = \frac{a_0}{h_x}(\psi_1 - \psi_0)$$

Met $\alpha_0^{\text{oost}} \equiv -\frac{a_0}{h_x}$ en $\alpha_0^{\text{cent}} \equiv \nu_{\text{west}} + \frac{a_0}{h_x}$ is

$$\alpha_0^{\text{cent}}\,\psi_0 + \alpha_0^{\text{oost}}\,\psi_1 \approx f_0 \equiv \nu_{\text{west}}\,\psi_{\text{west}}$$

Symmetrische eindige differenties

Beschouw een functie g op $D \equiv [0, X]$.

Voor $h > 0$ en $x \in [h, X-h]$ benaderen we $\frac{\partial g}{\partial x}(x)$ door

$$\frac{\partial}{\partial x} g(x) \approx \frac{1}{2h}\,[g(x+h) - g(x-h)]$$

Opmerkingen. $\alpha_i^{\text{west}}\,\psi_{i-1} + \alpha_i^{\text{cent}}\psi_i + \alpha_i^{\text{oost}}\,\psi_{i+1} = f_i$.

Gebruik $\qquad \alpha_0^{\text{cent}}\,\psi_0 + \alpha_0^{\text{oost}}\,\psi_1 \approx f_0 \qquad (\text{r}_{\text{west}})$

om ψ_0 te **elimineren** uit

$$\alpha_1^{\text{west}}\,\psi_0 + \alpha_1^{\text{cent}}\psi_1 + \alpha_1^{\text{oost}}\,\psi_2 = f_1. \qquad \text{(dif)}$$

$$\text{(Dif)} \;\Rightarrow\; \left(\alpha_1^{\text{cent}} - \alpha_1^{\text{west}}\,\frac{\alpha_0^{\text{oost}}}{\alpha_0^{\text{cent}}}\right)\psi_1 + \alpha_1^{\text{oost}}\,\psi_2 = f_1 - \alpha_1^{\text{west}}\,\frac{f_0}{\alpha_0^{\text{cent}}}.$$

Stencils

De vergelijking

$$\alpha_{ij}^{\text{west}}\,\psi_{i-1,j} + \alpha_{ij}^{\text{cent}}\,\psi_{ij} + \alpha_{ij}^{\text{oost}}\,\psi_{i+1,j} + \alpha_{ij}^{\text{zuid}}\,\psi_{i,j-1} + \alpha_{ij}^{\text{noord}}\,\psi_{i,j+1} = f_{ij}$$

wordt vaak gerepresenteerd middels een **stencil**:

$$\begin{bmatrix} & \alpha_{ij}^{\text{noord}} & \\ \alpha_{ij}^{\text{west}} & \alpha_{ij}^{\text{cent}} & \alpha_{ij}^{\text{oost}} \\ & \alpha_{ij}^{\text{zuid}} & \end{bmatrix}$$

Een stencil (voor het punt p_{ij}) is een compacte manier om aan te geven hoe in het rooster punt p_{ij} de onbekende functiewaarden $\psi_{i',j'}$ in de buurpunten van p_{ij} (de punten met $|i-i'| \leq 1$ en $|j-j'| \leq 1$) gekoppeld zijn.

Waarschuwing. Een stencil is een matrix, maar de actie is niet als die van de gebruikelijke matrix.

Symmetrische eindige differenties

Notatie. In 2-d model met $D \equiv [0, X] \times [0, Y]$:
Kies $n_x, n_y \in \mathbb{N}$ en $h_x \equiv X/(n_x+1)$, $h_y \equiv Y/(n_y+1)$
Schrijf $x_{ij} \equiv x_i \equiv i\,h_x$ en $y_{ij} \equiv y_j \equiv j\,h_y$
Als $g : [0, X] \times [0, Y] \to \mathbb{R}$, dan

$$g_{ij} \equiv g(x_{ij}, y_{ij}) = g(x_i, y_j) = g(i\,h_x, j\,h_j)$$

Voor ieder inwendig roosterpunt p_{ij} is er een vergelijking

$$\alpha_{ij}^{\text{west}}\,\psi_{i-1,j} + \alpha_{ij}^{\text{cent}}\psi_{ij} + \alpha_{ij}^{\text{oost}}\,\psi_{i+1,j} + \alpha_{ij}^{\text{zuid}}\,\psi_{i,j-1} + \alpha_{ij}^{\text{noord}}\,\psi_{i,j+1} = f_{ij}$$

waar geen functiewaarde buiten D° bij betrokken is (dus, bv, $\alpha_{1,j}^{\text{west}} = 0$ en $\alpha_{i,1}^{\text{zuid}} = 0$) en die een discretisatie is van het 2-d model.

Opdracht. Druk de **stencil coëfficiënten** α_{ij}^{xxx} in termen van de bekende grootheden a, b, c, ν_{xxx} en ψ_{xxx}.