Procesy Transportu w Środowisku — laboratoria

Agnieszka Żaba: azaba@agh.edu.pl

Semestr letni 2024/2025

Section 1

Wstęp

organizacja

- Kontakt: azaba@agh.edu.pl
- `https://github.com/AgnieszkaZaba/Procesy-transportu`
- Konsultacje: pn 9:45-11:15, s.7/D-10
- 10 spotkań — 6-9 modeli
- 2 nieobecności dozwolone, ale z koniecznością dosłania brakującego raportu.

zasady zaliczenia

Do oceny brane są pod uwagę:

1. Raporty po każdym ćwiczeniu - wysyłamy na maila + krótkie omówienie na zajęciach.
2. Pod koniec zajęć wysyłamy kod napisany na zajęciach.
3. Aktywność na zajęciach

Z każdego ćwiczenia wystawiana jest ocena - ocena końcowa jest średnią ocen z raportów.

Raporty

1. Opis fizyczny zagadnienia
2. Opis modelu matematycznego
3. Model numeryczny z zastosowanymi parametrami
4. Omówienie wyników symulacji (numeryczne, porównanie z wynikami)
5. Dalszy rozwój
6. + kod

Section 2

Podstawy modelowania

Eksponenta

Model matematyczny Równanie różniczkowe:

$$\frac{dx(t)}{dt} = \lambda x(t)$$

Rozwiązanie analityczne:

$$x(t) = x(0)e^{\lambda t}$$

Schemat różnicowy:

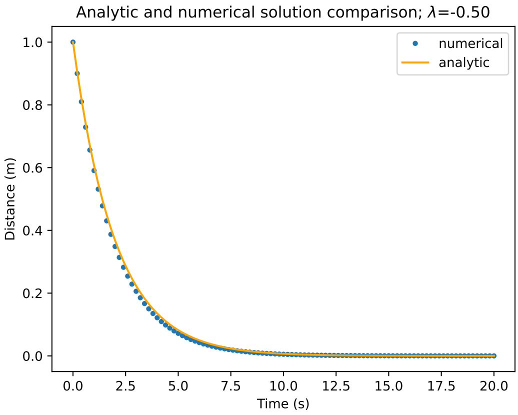
$$\frac{dx(t)}{dt} \approx \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{x(t+h) - x(t)}{h} = \lambda x(t)$$

$$x(t+h) = h\lambda x(t) + x(t) = x(t)(h\lambda + 1)$$

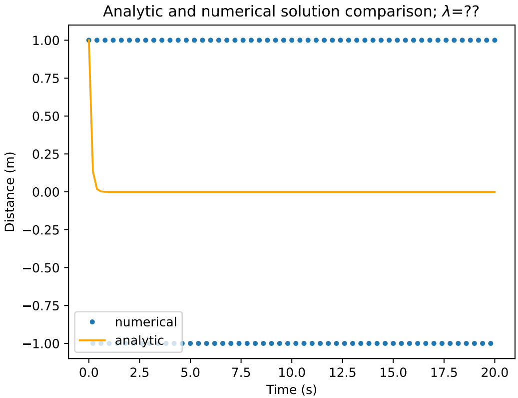
Aproksymowanie eksponenty

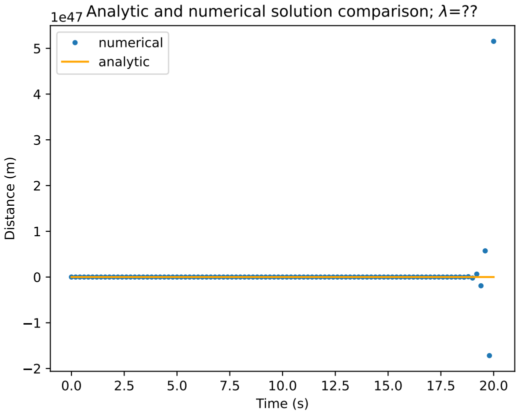
Schemat

$$x[n+1] = x[n] * (l * h + 1), \quad \text{dla } n = 0, \ldots, N$$



Problemy z modelowaniem numerycznym





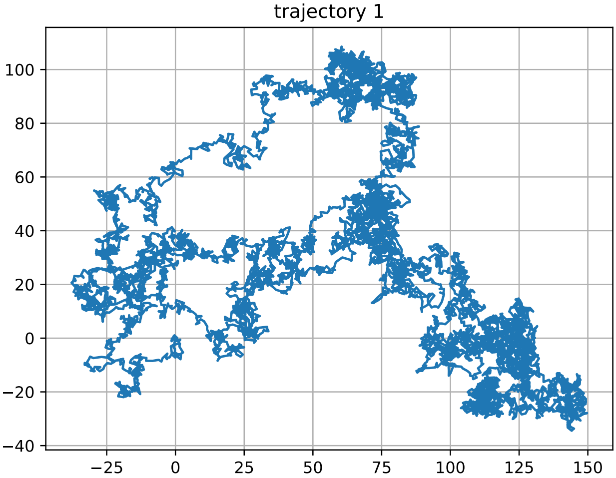
Section 3

Ruchy Browna

Ruchy Browna

Ruchy Browna zawdzięczają swą nazwę szkockiemu botanikowi Robertowi Brownowi. W trakcie badań prowadzonych w 1827 roku zaobserwował on gwałtowne i nieregularne ruchy pyłków roślin w zawiesinie wodnej. Początkowo tłumaczono to jakąś tajemniczą „siłą życiową”, jednak Brown wykazał, że takie same ruchy wykonują obumarłe pyłki oraz cząstki materii nieorganicznej. Nawiasem mówiąc wykorzystał do tego okruchy słynnego sfinksa. Mimo licznych prób, na naukowe wytłumaczenie tego zjawiska trzeba było czekać niemal 100 lat. Teorię ruchów Browna przedstawili niezależnie dwaj uczeni, Albert Einstein w 1905 roku oraz Marian Smoluchowski w 1906. Stwierdzili oni, że ruchy te wywoływane są zderzeniami z cząsteczkami rozpuszczalnika, a zatem dowodzą istnienia takich cząsteczek. Ponadto podali ilościowy opis swoich teorii, który między innymi pozwolił na doświadczalne wyznaczenie stałej Avogadro.

Realizacja ruchu Browna



Raporty — omówienie 20.03.2025

- Raporty wysyłamy razem z kodem źródłowym.
- Całych kodów nie umieszczamy w raporcie.
- Zamieszczanie pracy innych osób.
- Zrozumienie zamieszczonych informacji.

Ostatnio wymienione punkty raportu

1. Wstęp
2. Sformułowanie fizycznego zagadnienia
3. Matematyczna definicja
4. Schemat numeryczny
5. Wyniki
6. Wnioski

Wstęp

- mile widziany:)
- zawiera informacje ogólne o omawianym zagadnieniu, informacje historyczne (tło), mogą być opisane poprzednie badania
- w przypadku krótkiego wstępu nie wydzielamy go do osobnej sekcji

Fizyczne zagadnienie i matematyczna definicja

- połączenie pomiędzy ogólnym wstępem, a konkretnym rozważanym zagadnieniem
- odpowiada na pytanie: Jaki jest cel naszych badań, co chcemy osiągnąć?
- omawia konkretne rozważane zagadnienie
- definicja matematyczna — niekoniecznie dosłownie

Schemat numeryczny — metody

- opis wyboru modelu, jak schemat numeryczny jest skonstruowany, jakie wzory wprowadzane do programu
- jakich danych używamy? Skąd pochodzą?
- wartości fizyczne, a parametry modelu

Wyniki

- Zamieszczone wykresy, tabele, zdjęcia.
- Wykresy w grafice wektorowej, z opisanymi osiami, legendą oraz podpisem/tytułem.
- Wykresy omówione w tekście.

Wnioski

- Rzetelne, wynikające z raportu.
- Kilka zdań podsumowujących.
- Dobrze zrobione!
- Omówmy je na przykładzie kodu.

Section 4

Ćwiczenie drugie - rzeka

Równanie różniczkowe zwyczajne[1]

Mamy zagadnienie początkowe postaci

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y),$$

gdzie

$$y(x_0) = y_0.$$

Możemy zastosować rozwinięcie w szereg Taylora:

$$y(x+h) = y(x) + y'(x)h + \frac{1}{2}y''(x)h^2 + \dots . \tag{1}$$

Do jawnej metody Eulera bierzemy tylko dwa pierwsze wyrazy rozwinięcia.

[1] Fortuna Z. Macukow B. Wąsowski J. *Metody numeryczne (2017)*

Jawna metoda Eulera

Dla odcinka $x \in [0, 1]$ [m] stosujemy dyskretyzację: dzielimy odcinek na N kawałków, takich, że

$$x_0 = 0, \quad x_n = \frac{n}{N}, \quad x_N = 1, \quad \text{dla} \quad n = 1, \ldots, N-1. \tag{2}$$

Jawna metoda Eulera wyraża się wzorem

$$y_0 = y(x_0) \tag{3}$$

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \tag{4}$$

gdzie $n = 0, \ldots, N-1$ oraz h jest długością kroku przestrzennego.

Ćwiczenie 2.[2]

Metoda jawna – wyliczenie wartości szukanej funkcji w n+1 kroku czasowym na podstawie n-tego kroku.
Równanie do rozwiązania:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U\frac{\partial c}{\partial x} - D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0 \tag{5}$$

Warunki brzegowe: - lewa strona - warunek Dirichleta $c(0,t) = 0$ - prawa strona - warunek von Neumanna $\frac{\partial c}{\partial x}(L,t) = 0$
Warunek początkowy:

$$c(x,0) = f(x)$$

[2] Zimnoch M. *Materiały do wykładu Procesy Transportu w Środowisku*

Uproszczenie

Równanie:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U\frac{\partial c}{\partial x} - D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0. \tag{6}$$

Założenia:

- $U = 0$

Rozwiązujemy:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}. \tag{7}$$

Metoda różnicowa dla równań różniczkowych cząstkowych

Powrót do naszego równania

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}. \tag{8}$$

Należy rozrysować siatkę oraz ustalić warunki brzegowe (na tablicy).

27.03. – kontynuacja

Ponownie rozważamy równanie:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}. \tag{9}$$

Schemat różnicowy zastosowany na ostatnich zajęciach:

$$c_i^{n+1} = c_i^n + D\Delta t\frac{c_{i-1}^n - 2c_i^n + c_{i+1}^n}{(\Delta x)^2}. \tag{10}$$

Z dodaną adwekcją:

$$c_i^{n+1} = c_i^n + D\Delta t\frac{c_{i-1}^n - 2c_i^n + c_{i+1}^n}{(\Delta x)^2} - U\Delta t\frac{c_{i-2}^n - 2c_{i-1}^n + 2c_i^n - c_{i+1}^n}{2\Delta x}. \tag{11}$$

Oczywiście z zastosowaniem odpowiednich warunków brzegowych oraz początkowych (typu Dirichleta na poprzednich zajęciach). Jakim warunkom odpowiada nasza symulacja?

Opis zagadnienia

- Chcemy odpowiedzieć na pytanie: Jaki wpływ ma nielegalny zrzut zanieczyszczeń do rzeki na jakość wody w dalszych odcinkach rzeki?
- Rozważamy rzekę, która w uproszczeniu sprowadza się do jednego wymiaru. (Dlaczego?) Do rzeki będziemy wprowadzać znacznik (skorzystać z rozporządzenia Ministra Klimatu i Środowiska w sprawie dopuszczalnych stężeń zanieczyszczeń) i śledzić zmianę jego stężenia w rzece wraz z odległością od punktu wprowadzenia.
- Przyjmujemy, że na lewo od wprowadzenia znacznika stężenie wynosi 0 (dla rzeki płynącej w prawo). Jest to warunek Dirichleta postaci: (TODO na tablicy). Dla rozważanej długości rzeki L warunek prawej strony niech będzie warunkiem von Neumana: (TODO).

Opis ćwiczenia

W ramach ćwiczenia należy:

1. znaleźć wartości dla wybranej rzeki (np. Hydroportal ISOK): szerokość, głębokość (lub przekrój), średnia prędkość przepływu;
2. wybierać znacznik oraz jego stężenie początkowe c_0 oraz sprawdzić stężenie dopuszczalne zgodne z rozporządzeniami;
3. napisać program, który rozwiąże równanie metodą różnicową (zaproponowaną na zajęciach lub inną z uzasadnieniem wyboru)
4. przetestować zachowanie programu dla różnych kroków czasowych i przestrzennych.
5. Wyznaczyć procentową zawartość składnika dla kilku punktów kontrolnych.
6. przetestować program pod kątem prawa zachowania masy (całość znacznika powinna przepłynąć przez punkt L.

Schemat różnicowy dla równania adwekcyjno-dyspersyjnego

Stabilność z warunku Couranta-Friedrichsa-Lewy'ego[3]:

$$C_a = \left|\frac{U\Delta t}{\Delta x}\right| \leqslant 1, \quad \text{oraz} \quad U \geqslant 0. \tag{12}$$

Metoda QUICKEST[4]:

$$\begin{aligned}
c_i^{n+1} = c_i^n &+ \left(C_d(1+C_a) - \frac{C_a(C_a^2 - 3C_a + 2)}{6}\right) c_{i+1}^n \\
&- \left(C_d(2-3C_a) - \frac{C_a(C_a^2 - 2C_a - 1)}{2}\right) c_i^n \\
&+ \left(C_d(1-3C_a) - \frac{C_a(C_a^2 - C_a - 2)}{2}\right) c_{i-1}^n + \left(C_d C_a + \frac{C_a(C_a^2 - 1)}{6}\right) c_{i-2}^n,
\end{aligned}$$

gdzie $C_d = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$.

[3] https://en.wikipedia.org/wiki/Upwind_scheme

[4] Zimnoch M. *Materiały do wykładu Procesy Transportu w Środowisku*