

Sprawozdanie

Zastosowanie modeli o elementach skupionych do symulacji przepływów

Amadeusz Filipek

Laboratorium komputerowe WFiIS AGH

1. Wstęp

Celem ćwiczenia jest obliczenie średniego czasu przebywania wody w modelowanym obszarze zlewni rzeki.

Ze względu na znaczną złożoność procesu transportu wody w zlewni rzeki bardzo trudno jest wyprowadzić model fizyczny biorący pod uwagę wszystkie procesy i zjawiska występujące w rzekach. Znacznie prostszym podejściem jest traktowanie badanego obiektu jako „czarną skrzynkę”, o której działaniu nie wiemy nic ale na podstawie eksperymentu możemy badać jej własności. Do badań przepływu wody w zlewni rzeki wykorzystuje się naturalnie występujący w wodzie promieniotwórczy izotop wodoru – tryt. Pomiar stężenia wejściowego oraz wyjściowego trytu z badanego obszaru pozwala zbadać działanie takiej czarnej skrzynki i wyznaczyć czas przebywania wody w tym obszarze. Jeżeli odpowiedź układu jest liniowa to wartość stężenia w czasie jest konwolucją:

$$C_{out}(t) = \int_{-\infty}^t C_{in}(t')g(t-t')\exp[-\lambda(t-t')]dt' \quad (1)$$

gdzie λ stanowi stałą rozpadu trytu oraz g stanowi funkcję przejścia odpowiednią dla danego modelu. Dla pomiarów oraz obliczeń na ich podstawie powyższa całka przechodzi w sumę.

Funkcja g posiada parametry, których nie znamy. Znamy za to, na podstawie pomiaru, stężenie wejściowe oraz wyjściowe z układu w funkcji czasu. Możemy zatem wyznaczyć wartości parametrów dla których obliczone na podstawie równania (1) stężenie wyjściowe trytu najlepiej odwzorowuje stężenie zmierzone. Jest to zatem problem optymalizacyjny względem jakości dopasowania rozkładów stężeń wyjściowych. Jako miarę błędu odwzorowania stężenia wyjściowego trytu możemy przyjąć parametr RMSE (round mean square error) równy:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^N (C_{out}^{calc}(t_i) - C_{out}^{exp}(t_i))^2}$$

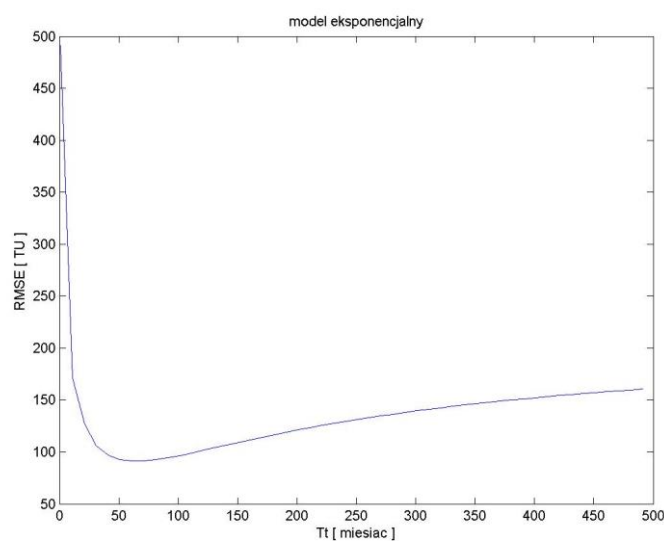
Badanym w ćwiczeniu obszarem jest zlewnia rzeki Dunaj. Na obszarze zlewni ustacjonowane są stacje pomiaru stężenia trytu w wodzie opadowej. Wyliczona średnia ważona na podstawie tych pomiarów stanowi dane wejściowe do „czarnej skrzynki”, natomiast za stężenie wyjściowe odpowiadają pomiary stężenia trytu w Dunaju na obszarze Wiednia.

2. Model Eksponencjalny

Model eksponencjalny zakłada funkcję przenoszenia postaci:

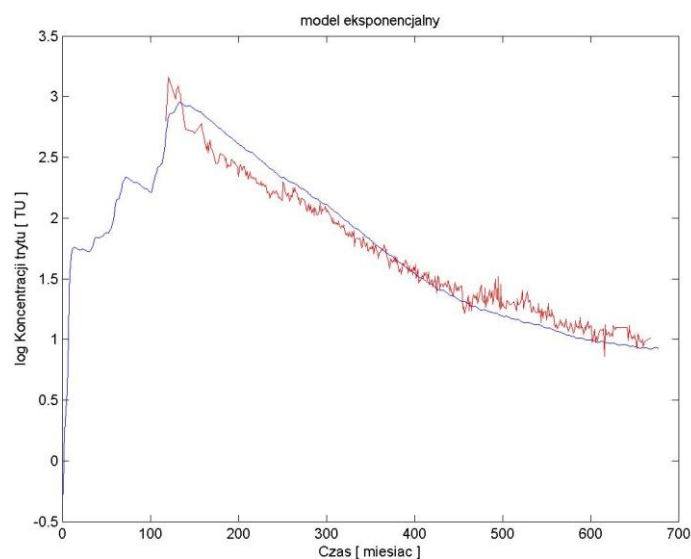
$$g(t') = \frac{1}{t_t} \exp\left(-\frac{t'}{t_t}\right)$$

gdzie t_t jest średnim czasem przebywania wody w modelowanym obiekcie. Model eksponencjalny posiada zatem jeden parametr względem którego należy przeprowadzić optymalizację. Uzyskane wartości RMSE w funkcji parametru t_t przedstawione są na poniższym wykresie:



Wykres 1. Wartości błędu RMSE w funkcji średniego czasu przebywania wody w zlewni

Powyższa krzywa posiada minimum dla $t_t = 60$ miesięcy przy $RMSE = 90$ TU (TU – jednostka trytowa, stężenie 1 atomu trytu na 10^{18} atomów wodoru). Obliczony rozkład stężenia trytu na tle rozkładu pomiarowego dla optymalnej wartości t_t wygląda następująco:



Wykres 2. Rozkład wyjściowy stężenia trytu, krzywa niebieska – stężenie obliczone, krzywa czerwona – stężenie pomiarowe

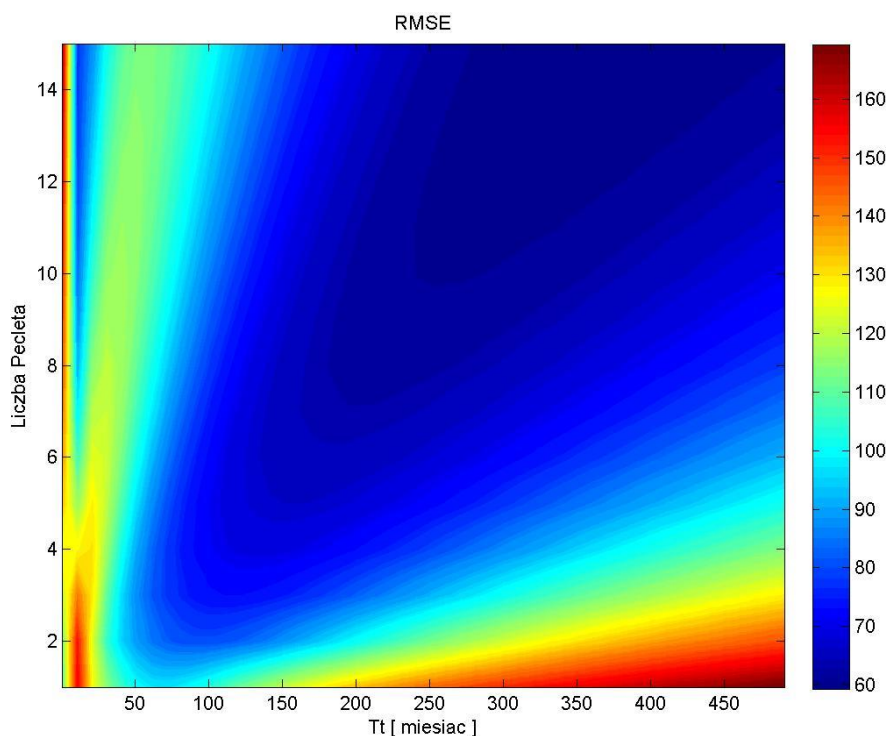
Powyższa krzywa dość dobrze odwzorowuje dane pomiarowe, nie wykazuje jednak szumów. Duże zmiany stężenia trytu na przestrzeni lat wynikają z prób nuklearnych prowadzonych w latach 50' oraz 60' ubiegłego wieku.

3. Model dyspersyjny

Bardziej zaawansowanym modelem pudełkowym jest model dyspersyjny, który zakłada funkcję przejścia w postaci:

$$g(t') = \frac{1}{t'} (4\pi \cdot Pe \cdot t' / t_t)^{-1/2} \cdot \exp \left[-\frac{(1 - t' / t_t)^2}{4 \cdot Pe \cdot t' / t_t} \right]$$

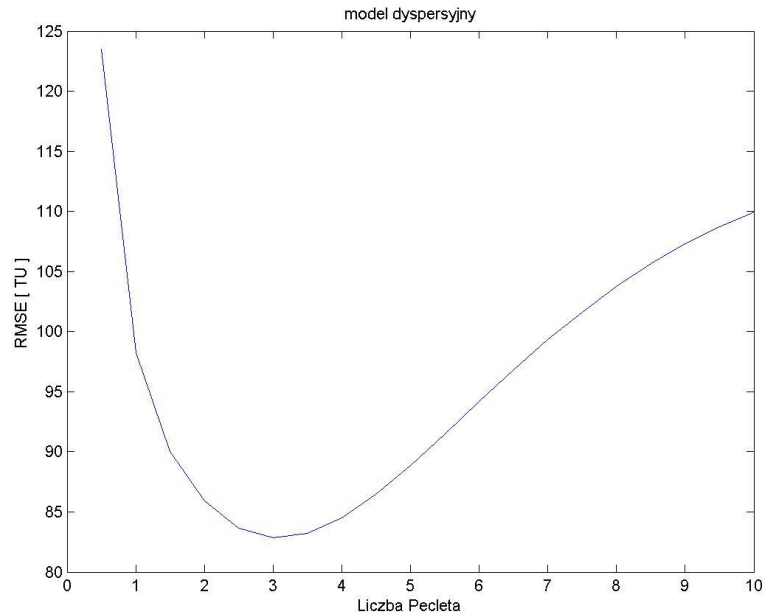
gdzie Pe stanowi liczbę Pecleta. Model ten zawiera dwa parametry, względem których należy przeprowadzić optymalizację. Przeprowadziłem obliczenia błędu RMSE dla różnych wartości Pe oraz t_t , uzyskany rozkład błędu przedstawiony jest poniżej:



Wykres 3. Rozkład błędu RMSE w przestrzeni parametrów Pe oraz t'

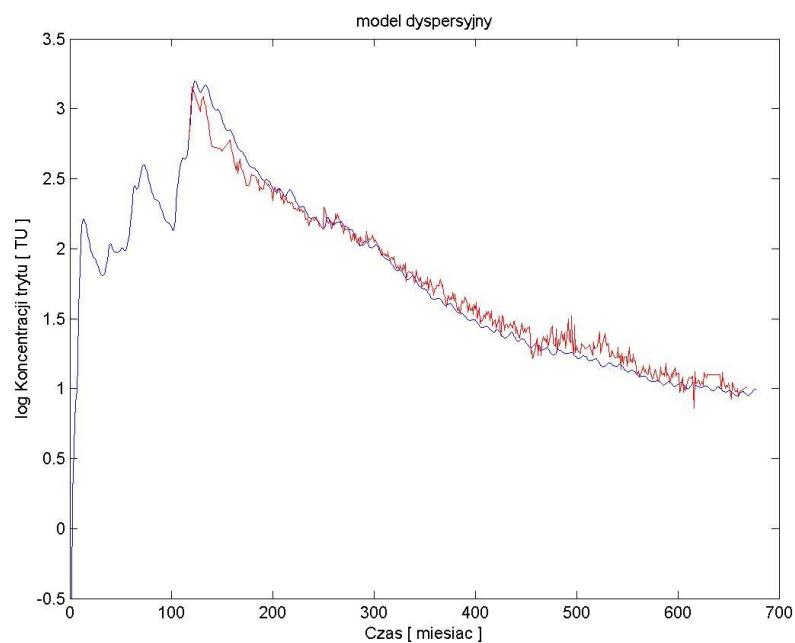
Powyższy wykres pokazuje że problem znalezienia minimalnej wartości RMSE nie jest tak trywialny ze względu na różne obszary monotoniczności funkcji. Minimum lokalnego szukać można w obszarze małych czasów przebywania zarówno dla dużych wartości liczby Pecleta jak i bardzo małych. Warto by zatem mieć pewne informacje co do realnych wartości szukanych parametrów. Warto zwrócić uwagę na uzyskane wartości funkcji RMSE, które sięgają 60 TU, znacznie mniej niż w przypadku pierwszego modelu. Wprowadzenie do modelu większej ilości parametrów pozwala nam lepiej dopasować model, jednakże optymalizacja tych parametrów może być problematyczna.

Jeśli jednak przyjąć czas przebywania równy czasowi wyznaczonemu w pkt. 2 $t_t = 60$ miesięcy to można prosto wyznaczyć optymalną dla tego czasu liczbę Pecleta. Uzyskany wykres błędu RMSE w funkcji liczby Pecleta wygląda następująco:



Wykres 4. Wartości błędu RMSE w funkcji liczby Pecleta dla $t_t = 60$ miesięcy

Uzyskana optymalna wartość liczby Pecleta wynosi $Pe = 3$. Dla takich parametrów błąd $RMSE = 83$ TU. Obliczony rozkład stężenia trytu na tle rozkładu pomiarowego dla optymalnej wartości t_t wygląda następująco:



Wykres 5. Rozkład wyjściowy stężenia trytu, krzywa niebieska – stężenie obliczone, krzywa czerwona – stężenie pomiarowe

Uzyskany rozkład znacznie lepiej odwzorowuje dane doświadczalne od rozkładu uzyskanego prostym modelem eksponencjalnym. Rozkład znacznie lepiej podąża za szybkozmiennym szumem.

4. Podsumowanie

W ramach ćwiczenia wykonałem obliczenia stężenia trytu w zlewni Dunaju wykorzystując modele pudełkowe do obliczenia średniego czasu przebywania wody w zlewni. Obliczenia przeprowadziłem dla prostego modelu eksponencjalnego o jednym parametrze oraz dla bardziej skomplikowanego modelu dyspersyjnego o dwóch parametrach. Dla obu modeli wykonałem analizę optymalizacji parametrów. Wyzaczyłem średni czas przebywania wody w zlewni. Zauważyłem, że skomplikowane modele o większej ilości parametrów lepiej odwzorowują dane doświadczalne jednakże ciężiej jest znaleźć optymalne wartości tych parametrów. Ponadto, tryt występujący naturalnie w przyrodzie stanowi dobry znacznik do badań środowiskowych.