

STRUKTURA APLIKACJI DO SYMULACJI PRZEPŁYWU WODY PRZEZ DWUWYMIAROWY ÓŚRODEK POROWATY

Jan Vogelgesang, Krzysztof Molenda, Dariusz Pikul

Instytut Inżynierii Rolniczej i Informatyki, Uniwersytet Rolniczy w Krakowie

Streszczenie. Celem pracy było opracowanie podstaw aplikacji, która mogłaby być stopniowo rozszerzana i służyła symulacjom przepływu płynów w glebie. W artykule przedstawiono strukturę wyjściową i opartą o nią symulację przepływu wody w dwuwymiarowym ośrodku porowatym w odniesieniu do prawa Darcy'ego. Jakość symulacji oceniano na podstawie obliczanego współczynnika przewodności hydraulicznej i porównania go z wartościami doświadczalnymi. Metodę symulacji oparto o automat komórkowy typu HPP. Określono kolejne kroki rozwoju aplikacji dla modelowania bardziej złożonych zjawisk w trakcie przepływów.

Słowa kluczowe: przepływ, gleba, metoda obliczeniowa, model komputerowy

Wprowadzenie

Przepływy w glebie wymagają opisu wieloskalowego. Większość modeli ujmujących stosunki wodne w glebach obejmuje skale rzędu metrów lub więcej. Służą one, ogólnie, bilansowaniu zasobów wodnych w kontekście wymagań technologicznych dla prowadzenia upraw. Natomiast przepływy istotne dla wzrostu pojedynczej rośliny trzeba rozważać w małych skalach. Zasadnicze procesy wymiany zachodzą w niewielkiej części korzenia, tzw. strefie włośników, gdzie odpowiednimi skalami są mezoskopowa – rzędu centymetrów, obejmująca obszar przyległy do strefy wymiany, oraz mikroskopowa – rzędu mikrometrów, odniesiona do zjawisk na poziomie poszczególnych komórek.

Analiza w małej skali przepływów w glebie, ośrodku niezwykle złożonym, wymaga uwzględniania szczegółów pomijanych na ogół w skali makro. Chaotyczna i skomplikowana geometria porowatego ośrodka przepływu uniemożliwia analityczne sformułowanie warunków brzegowych. Tracą też częściowo znaczenie równania Naviera-Stokesa (NS) i wiele pochodzących od nich modeli [Kandlikar i in., 2005]. Specyficzne zjawiska opisane przez Mazurka i Pawułę [1980], a także wielu innych, ich uwikłanie, skłaniają do wyrażenia poglądu, że adekwatne modele powinny być oparte o metody informatyki [Vogelgesang i in. 2010]. Odległym celem modelowania, z punktu widzenia upraw roślin, jest oddanie cech przepływów determinowanych głównie strukturą gleb dla ukazania ważnego dla tej uprawy parametru, np. wartości pF .

Liczne programy komercyjne i inne CFD (*Computational Fluid Dynamics*), z „zaszytymi” wyrafinowanymi metodami obliczeniowymi mogą symulować przepływy przez ośrodki porowate, np. programy MOD-FLOW czy FLUID. Niemniej, odrębność środowi-

ska przepływu jakim jest gleba, usprawiedliwia prace nad bardziej ukierunkowanym oprogramowaniem z własnymi, specjalistycznymi bibliotekami.

Obiecującą konstrukcją formalną, pomocną w uchwyceniu przynajmniej części złożoności występujących zjawisk w glebie jest automat komórkowy. Automat ten jest uniwersalną maszyną obliczeniową, która odpowiednio zaprogramowana może przechodzić przez kolejne stany odwzorowujące stany obiektów rzeczywistych. Wśród przydatnych do opisu przepływów płaskich wyróżnia się model HPP (1973) oraz nowszy FHP (1986) – ich opisy są dostępne w Wikipedii (*Lattice gas automaton*) oraz w pracach publikowanych przez ośrodki akademickie [Kułakowski 2000] wraz z przykładami zastosowań. Skrótów nazw modeli pochodzą od nazwisk ich twórców: *HPP – Hardy, Pomeau and de Pazzis*, *FHP – Frisch, Hasslacher and Pomeau*. Wykorzystany w dalszej części pracy automat HPP działa w oparciu o reguły zachowań cząstek po ich zderzeniu w węzle siatki prostokątnej. Jakkolwiek nie stosuje się go w zaawansowanych symulacjach, to z uwagi na prostotę reguł i łatwość oprogramowania jest dobrym narzędziem dla testowania koncepcji oraz ułatwia wstępne analizy. Nabywanie doświadczeń własnych jest tu szczególnie istotne. Przedstawione niżej opracowanie należy interpretować w tym właśnie kontekście.

Założenia i metoda

Celem badań była aplikacja, która spełniałaby rolę prototypu i umożliwiła w przyszłości symulowanie niektórych, bardziej złożonych zjawisk przepływu w glebie. Dlatego samą jej koncepcję potraktowano szerzej niż wynikałoby to z potrzeb rozważanego przypadku. Z punktu widzenia celu pracy i przyszłych zamierzeń wykorzystano dwie ważne zalety programowania obiektowego:

- możliwości powtórnego użycia, co oznacza, że wprowadzenie nowych funkcji aplikacji można oprzeć o zaprojektowane wcześniej klasy, czyli z wykorzystaniem wzorcowych schematów, a także kodów źródłowych,
- łatwej rozszerzalności, polegającej na możliwości uwzględnienia nowych zjawisk jako kontynuacji rozbudowy konstrukcji aplikacji poprzez dołączanie nowych elementów, a nie przez jej całkowitą przebudowę.

Nadmienimy, że dla rozważanego dalej przykładu wystarczyłoby stosunkowo krótki kod, np. w języku proceduralnym, ale wtedy aplikacja stanowiłaby konstrukcję zamkniętą, trudno podatną na potrzebne rozszerzenia.

Punktem wyjścia była symulacja zjawiska przepływu swobodnego wody w ośrodku ziarnistym o określonym stopniu porowatości w wybranym przekroju, a więc w wymiarze 2D. Porowatość w tym przypadku była określona stosunkiem powierzchni zajmowanej przez wolne przestrzenie do całkowitej powierzchni przekroju. Jedną z metod modelowania przepływu płynów o małej lepkości w mezoskali jest metoda LBG (*Lattice Boltzmann Gas*). Metoda nie jest dyskretyzacją równań różniczkowych, ale w sposób bezpośredni oddaje przepływ. Płyn (tutaj woda) składa się z myślowo wydzielonych cząstek, z których każda może zawierać wiele milionów cząsteczek rzeczywistych. Wyróżniona cząstka powinna być znacznie mniejsza od wymiaru charakterystycznego kanału przepływu. Ruch cząstki odbywa się po siatce w zależności od konfiguracji cząstek ją otaczających oraz przeszkód (ziarna). W metodzie LBG cząstka w określonym kierunku może poruszyć się tylko z pewnym prawdopodobieństwem, które wyznacza się z równania S. Boltzmana.

W równaniu tym po lewej stronie stoją wyrażenia oddające przepływ w postaci różniczkowej (tradycyjnej), a po prawej tzw. jednopunktowy rozkład prawdopodobieństwa. Równanie to wyraża stwierdzenie, że makroskopowo obserwowany ruch płynu jest statystycznym obrazem zachowań mnogości cząstek. W sposób naturalny wykorzystuje się tutaj ideę obliczeń opartą o automat komórkowy. Poczynając od stanu wyjściowego automatu, komputer przelicza możliwy ruch każdej cząstki umieszczonej na siatce i tworzy nowy obraz wszystkich ich położań. Obraz ten staje się następnym stanem automatu i służy kolejnemu przeliczeniu. Ewoluujący automat odzwierciedla zjawisko na podobieństwo filmu, „klatka po klatce”. Dwa kolejne obrazy wyznaczają krok czasowy t .

Opisaną metodę zastosowano w odniesieniu do prawa Darcy’ego, które w przeszłości było poddawane eksperymentom cyfrowym przy użyciu wielu technik, z wykorzystaniem dużej mocy obliczeniowych. Założono, że woda w przepływie swobodnym nie wchodzi w interakcje z ziarnami. Strukturę ośrodka przepływu opisują wymiary charakterystyczne ziarna Z [mm] i porów P [mm]. Zmienne te są w pewnym zakresie niezależne, łącznie oddają wspomnianą porowatość przekroju ośrodka P . Aby uniknąć niepotrzebnych w fazie wstępnej komplikacji strukturalnych przyjęto takie zakresy dla Z (≥ 1 mm) i P ($\geq 0,6$ mm), które pozwalały pomijać zjawiska przyścienne i związane z nimi efekty molekularne, kapilarne lub inne. Przepływy przez izotropową warstwę porowatą charakteryzuje jeden współczynnik (makroskopowy) przewodnictwa hydraulicznego k wyrażany w [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$], nazywany też współczynnikiem filtracji. Współczynnik ten wyznacza się na drodze doświadczalnej dla różnych rodzajów gleb, gruntów, a jego wartości podają odpowiednie tablice. Z uwagi na geometryczną złożoność ośrodka porowatego wyznaczenie współczynnika k na drodze teoretycznej wiąże się z dużymi trudnościami.

Woda o pewnej małej objętości kontrolnej, znajdująca się w kanale cienkiej warstwy porowatej (rzędu centymetrów) jest w stanie równowagi, jeśli siłę grawitacji oraz lepkości równoważy różnica ciśnień pomiędzy początkiem i końcem kanału. Pomija się tutaj zmiany ciśnienia atmosferycznego oraz nie uwzględnia ciśnienia hydrostatycznego. Natomiast wspomniana różnica ciśnień wynika ze strat na skutek tarcia cieczy o kanały materiału porowatego i świadczy o oporze przepływu. W powolnych przepływach przez glebę, rzędu centymetrów na dobę, oraz braku ciśnienia wymuszającego, przyjmując stałą lepkość, o przewodności hydraulicznej będzie świadczył objętościowy przepływ przez warstwę. Zatem:

$$k = q$$

gdzie q jest objętościowym przepływem właściwym, tj. przepływem przez powierzchnię 1 m^2 czasie 1 s. Dzieląc wymiar objętości przepływającej cieczy L^3 przez wymiar powierzchni L^2 oraz wymiar czasu T otrzymamy, że $L^3 L^{-2} T^{-1} = L T^{-1}$. Wielkość q ma zatem wymiar prędkości.

W symulacji przepływ q_{sym} jest liczbą cząstek opuszczających warstwę w pewnej liczbie kroków czasowych odpowiadających 1 s. Średnią prędkość cząstki v_{sym} obliczano jako średnią prędkości wszystkich cząstek. Prędkością cząstki jest stosunek grubości warstwy do liczby kroków czasowych potrzebnych do przebycia tej warstwy.

Skalowanie rzeczywistego „objętościowego przepływu właściwego” do symulowanego opisuje równanie:

$$k = a q_{sym}$$

gdzie a jest bezwymiarowym współczynnikiem skali. Potrzeba wprowadzenia tego współczynnika wynika z faktu, że symulowany był przepływ „płaski”, podczas gdy dane doświadczeniowe współczynniki k obejmują ośrodki przestrzenne. Stałość współczynnika skali pomimo zmian parametrów ośrodków przepływu świadczyłaby o dobrej jakości metody symulacji. Dysponowanie kryterium jakości modelu pozwoliło zastąpić określanie rozkładu prawdopodobieństw ruchu cząstki na założonym kierunku z równań Boltzmana i innych (np. dotyczących sztucznej lepkości) metodą dopasowania rozkładu. Postępowano następująco:

- na siatkę kwadratową automatu komórkowego 2D nanoszono strukturę przeszkód dla ustalonego w danej chwili ośrodka przepływu o cechach Z i P poprzez metodę losowego generowania tej struktury. W ten sposób możliwa była realizacja wielu struktur zachowujących wyróżnione wskaźniki,
- w zależności od typu automatu zakładano prawdopodobieństwa ruchu cząstek znajdujących się w określonych konfiguracjach. W tym celu opracowano kilka scenariuszy zachowań cząstek, przyjmując zrozumiałe zasady:
 - symetria konfiguracji „lewo” „prawy” pociągała równość prawdopodobieństw ruchu,
 - prawdopodobieństwo ruchu w dół jest największe (decyduje o prędkości przepływu),
 - prawdopodobieństwo ruchu w jedynym możliwym kierunku jest równe jedności, za wyjątkiem prawdopodobieństwa ruchu w górę,
 - prawdopodobieństwo ruchu cząstki w górę przyjęto zawsze równe zero, choć jest to uproszczenie (w pewnych konfiguracjach kanałów woda lokalnie ma możliwość poruszania się do góry),
 - wewnętrzne reguły zapewniały ciągłość przepływu tak, aby w sąsiedztwie każdej cząstki wody znajdowała się cząstka wody.

Dla próbnie dobieranych wartości liczbowych (prawdopodobieństw) przeprowadzono symulację dla różnych Z i P porównując uzyskane wartości q_{sym} z wartościami zawartymi w literaturze. Podstawowym pytaniem było, czy model oddaje współczynniki przewodności hydraulicznej w obrębie przepływów swobodnych typu zachowując skalę a .

Opis aplikacji

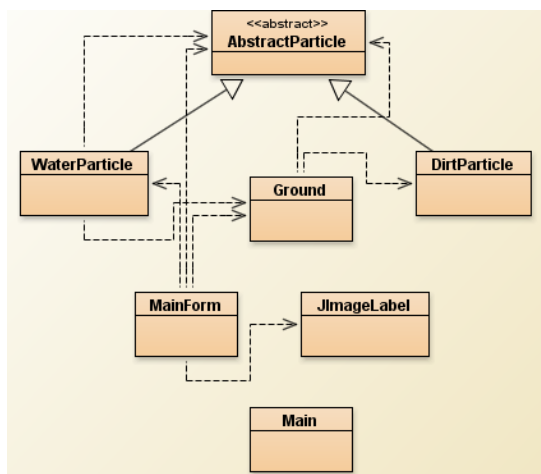
Przedstawione w pracy modele zaimplementowano z wykorzystaniem języka Java 6 oraz zintegrowanego środowiska programistycznego NetBeans. Mając na uwadze wspomniane, przyszłe rozszerzenia utworzono następujące klasy (rys. 1):

- `AbstractParticle` – klasa abstrakcyjna, zawierająca metody abstrakcyjne aktualizujące stan cząstek płynu i ośrodka przepływu,

Struktura aplikacji...

- `DirtParticle` – klasa dziedzicząca po `AbstractParticle`, reprezentuje strukturę ośrodka przepływu (ułożenie, własności ziarn). Klasa ta może zawierać metody aktualizujące stan zróżnicowanych cząstek gleby,
- `WaterParticle` – klasa dziedzicząca po `AbstractParticle`, reprezentująca cząstki wody, opowiada za ich bieżące ustawienie oraz metody odpowiedzialne za aktualizację stanu cząsteczki względem otoczenia,
- `Ground` – jest klasą szkieletową reprezentującą materiał porowaty. Został w niej określony rozmiar siatki obliczeniowej. Zawiera metody odpowiedzialne za losowe tworzenie struktury gruntu o zadanej porowatości oraz ich odpowiednie rozmieszczenie. Podstawowa metoda tej klasy odpowiada za obliczanie współczynnika k ,
- `MainForm`, `JImageLabel` – są klasami odpowiedzialnymi za graficzny interfejs użytkownika – za przedstawienie wykonywanej symulacji oraz dostarczenie interfejsu do wprowadzania parametrów zadanej wartości porowatości i średnicy ziarna,
- `Main` – klasa zawierająca metodę `main`, tworzącą nowy wątek dla aplikacji i jej środowiska graficznego, a następnie uruchamiająca główny formularz.

Z uwagi na pilotażowy charakter, aplikacja miała działać na jednym komputerze. Rozmiar oczka siatki odpowiada 1 mm^2 rzeczywistej powierzchni, a rozpatrywany przekrój wymiarom $20 \times 20 \text{ cm}$. Wynikało stąd ograniczenie siatki (200×200), które przyjęto mając na uwadze nie tylko obliczenia, ale i wizualizację (rys. 2) procesu przepływu (złożoność obliczeniowa $O(N^2)$). Skala czasowa wizualizacji powodowała około 100-krotny wzrost prędkości przepływu symulowanego.

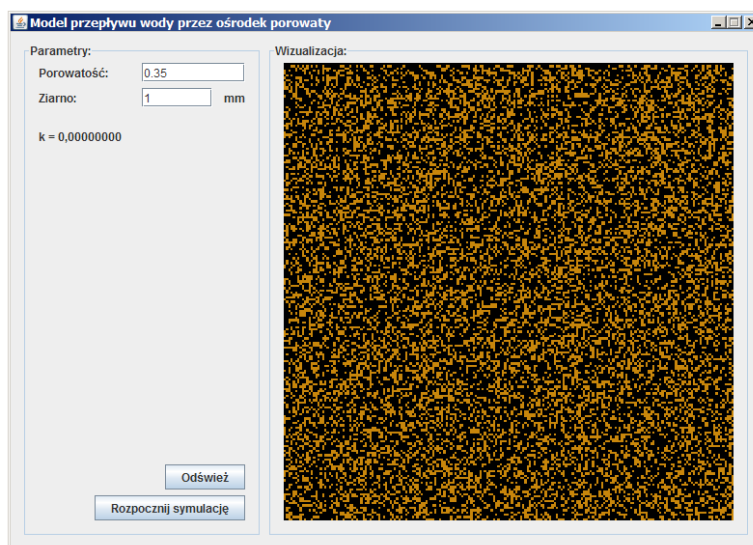


Rys. 1. Poglądowy diagram klas projektowanej aplikacji
Fig. 1. A reference diagram of classes of the designed application programme

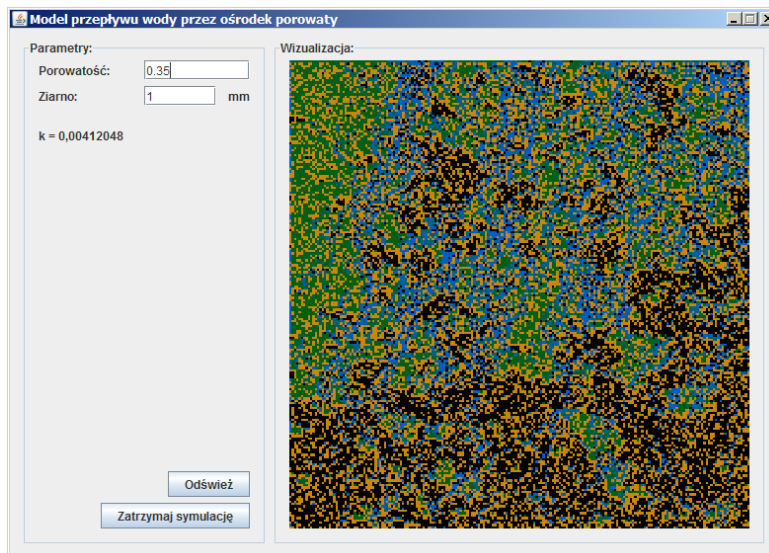
Na rysunku 2 w polach po lewej stronie u góry można wprowadzić w pewnych przedziałach niezależnie: porowatość oraz wielkość ziarna. Następnie zostaje losowo określona struktura ośrodka ziarnistego (rys. 2a). Rysunek 2b ilustruje przepływ ustalony –

kolor niebieski oznacza przepływającą wodę przy czym dodatkowo kolorem zielonym wyróżniono cząstki o prędkości większej od dwukrotnej średniej. Cząstki te poruszają się szybciej w miejscach lokalnych przewężeń. W czasie trwania symulacji obliczana jest ciągle wielkość k świadcząca o przewodności hydraulicznej tego ośrodka.

a)



b)



Rys. 2. Interfejs aplikacji
Fig. 2. Application interface

Wyniki i ich dyskusja

Badano wstępnie zachowanie automatu Moora (uwzględniającego 8 sąsiadów lub równoważnie – 8 kierunków ruchu cząstki) oraz automat Neumanna (4 kierunki), nie rozważano automatu z siatką sześciokątną. Uznano, że w obrębie dysponowanych danych doświadczalnych nie można wykazać znaczącej różnicy pomiędzy tymi typami automatów i do dalszej analizy wybrano automat Neumanna, prostszy i wnoszący mniejszą złożoność obliczeniową. Przyjęty typ był więc koncepcyjnie zbliżony do deterministycznego automatu HPP. W tabeli 1 przedstawiono odpowiednie dane (każda symulacja była powtarzana co najmniej 5-krotnie).

Tabela 1. Wyniki symulacji
Table 1. Simulation results

Rozmiar ziarna Z	1 mm	2 mm	3 mm
Porowatość P	0,36	0,34	0,3
Symulowane q [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$] $\cdot 10^{-3}$	3,025	4,3	5,95
Wartość średnia k [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$] $\cdot 10^{-3}$ (wg literatury)	0,58	0,87	1,305
Współczynnik skali a dla wartości uśrednionej k	0,19	0,20	0,22

Wartości średnie k w tabeli wyznaczono przyjmując zakresy podawane w literaturze:

- ziarno 1 mm: piaski gruboziarniste $k = (0,87 - 0,29) \cdot 10^{-3} [\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$,
- ziarno 2 mm: piaski gruboziarniste żwirowate $k = (1,16 - 0,58) \cdot 10^{-3} [\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$,
- ziarno 3 mm: żwiry piaszczyste $k = (1,74 - 0,87) \cdot 10^{-3} [\text{m}\cdot\text{s}^{-1}]$.

Wartości przepływu q uzyskiwano przy prawdopodobieństwach: $p(\text{górze}) = 0$, $p(\text{dół}) = 0,5$, $p(\text{prawo}) = p(\text{lewo}) = 0,25$.

Przyjmując jako podstawę porównań wartości uśrednione współczynnika k oraz podane wartości prawdopodobieństw uzyskano małą zmienność współczynnika a , którego wartości przedstawia tabela 1. Stabilność ta potwierdza, że w tym zakresie model odzwierciedlał zjawisko przepływu.

Przy porównaniu wartości skrajnych zmienność a wzrastała do ok. 20%. Próbné zmiany w otoczeniu ustalonych wartości prawdopodobieństw przynosiły pewną poprawę, ale prób tych nie rozszerzano z uwagi na aspekty dyskusyjne.

Pierwszy aspekt dotyczy danych literaturowych, które obejmują ośrodki rzeczywiste, a te są zawsze mieszaniną frakcji i prowadzą do niepewności porównań.

Drugi i bardziej złożony problem wynika z relacji pomiędzy odwzorowaniem wybranych cech struktury przestrzennej na strukturę powierzchniową. W ukierunkowanym przepływie płynu jednorodnego w ośrodku izotropowym, obraz w przekroju oddaje istotne cechy przepływu. Odpowiednie relacje związane z prawem Darcy w przepływach płaskich przedstawiono w pracy pod reakcją Michalaka [2011]. Jednak problematyczne jest utworzenie takiej geometrii przeszkód, która odzwierciedlałaby rzeczywiste stosunki przestrzenne. Dla ilustracji tych trudności przedstawiamy następujące oszacowania: ustalona powierzchnia pokryta kołami o jednakowej średnicy, ułożonymi na siatce kwadratów utworzy

strukturę o porowatości „płaskiej” 21%, podczas gdy te same koła na siatce trójkątów równobocznych dają porowatość prawie 2-krotnie mniejszą (11%). Natomiast kule pokrywające ustaloną objętość rozmieszczone na siatce sześcienniej, a następnie czworościanów foremnych wyznaczają odpowiednio porowatości „przestrzenne” 47% i 40%. Przypadkowy przekrój przez układ kul np. na sieci sześcienniej może charakteryzować się strukturą powierzchniową o porowatości od 100% (przekrój przez punkty styczności) do wspomnianych 21%. Analiza geometrii przekrojów komplikuje się, jeśli odnieść ją do materiałów rzeczywistych. Przyjęta w symulacji porowatość przekroju ok. 35% miała odpowiadać losowemu rozmieszczeniu ziarn w przestrzeni, ale prowadziła do braku styczności ziarn na przekroju i nadmiernie ułatwiała przepływ, co skutkowało, że $a < 1$. Porowatość ta, w ogólnym przypadku mogła być jednak odzwierciedleniem różnych porowatości przestrzennych, i stąd należało posługiwać się dość szerokimi zakresami porównawczych danych literaturowych. Problemy geometryczne symulacji w przekrojach wymagają bardziej szczegółowych analiz i wykorzystania osiągnięć stereologii.

Podsumowanie

W podsumowaniu należy stwierdzić, że opracowany, wstępny model, kalibrowany w oparciu o dane literaturowe oddaje obraz zjawiska z dokładnością do wyróżnionych wartości liczbowych, niemniej nie pozwala na szersze interpretacje w układach przestrzennych. Z tych względów, w powiązaniu z wizualizacją opracowany model posiada głównie walory ilustracyjne i dydaktyczne. Opracowana aplikacja, jej struktura pozwala w przyszłości na rozszerzenie symulacji przepływu w kierunku uwzględniania zjawisk w trzech wymiarach, w tym przyściennych, których rola zwiększa się przy zmniejszonych ziarnistościach. Mając to na uwadze, zmiany programu powinny iść w kierunku uwzględnienia wielowątkowości i równoległości obliczeń.

Bibliografia

- Vogelgesang J., Molenda K., Wacięga M. 2010. Guidelines for micro- and mesoscale computer modelling of fluid flows in the soil-root system. *Agricultural Engineering* 6(124). pp. 113-120.
- Kandlikar S., Garimella S., Li D., Colin S., King M. 2005, Heat transfer and fluid flow in minichannels and microchannels. ELSEVIER. ISBN 10: 0-08-044527-6
- Michalak J. (red.) 2011. Schematyzacja warunków hydrogeologicznych na potrzeby numerycznego modelowania przepływu w JCWP. Materiały Państwowego Instytutu Geologicznego, Państwowego Instytutu Badawczego, dostępne w sieci WWW, http://www.psh.gov.pl/plik/id,6091_v,artykul_4003.pdf, dostęp: 2011.12.21
- Mazurek K., Pawuła A. 1980. Dyspersja zanieczyszczeń chemicznych w ośrodku porowatym i jej symulacja na modelach cyfrowych. *Biuletyn Instytutu Kształtowania Środowiska* 12, s. 19-25.
- Kulakowski K. 2000. Automaty komórkowe. Skrypt. OEN AGH. [dostęp: 2011.12.21]. Dostępne w internecie: <http://www.ftj.agh.edu.pl/~kulakowski/AC/skrypt.pdf>
- Lattice gas automaton. Wikipedia, The Free Encyclopedia. [dostęp: 2011.12.21]. Dostępny w internecie: http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Lattice_gas_automaton&oldid=442335290

STRUCTURE OF AN APPLICATION PROGRAMME FOR SIMULATION OF WATER FLOW THROUGH A TWO-DIMENSIONAL POROUS MEDIUM

Abstract. The purpose of the work was to prepare basis of an application programme, which could be gradually developed and would be used for simulation of liquids flow in soil. The article presents an output structure and a simulation of water flow in a two-dimensional porous medium based on it on account of Darcy theory. Quality of simulation was assessed based on a calculated coefficient of hydraulic conductivity and comparing it with experimental values. The simulation method was based on a cellular automaton of the HPP type. Next steps of an application development were determined for modelling phenomena that are more complex during flows.

Key words: flow, soil, calculation method, computer model

Adres do korespondencji:

Krzysztof Molenda; e-mail: Krzysztof.Molenda@ur.krakow.pl
Instytut Inżynierii Rolniczej i Informatyki
Uniwersytet Rolniczy w Krakowie
ul. Balicka 116B
30-149 Kraków