

TÍNH TOÁN MÔ PHÒNG LAN TRUYỀN CHẤT SỬ DỤNG PHẦN MỀM ANSYS

Phạm Ngọc Dũng, Bùi Tá Long¹
Viện Môi trường và Tài nguyên

Tóm tắt

Hiện nay, các tính toán quá trình truyền các chất hòa tan có ý nghĩa lớn đối với việc lập kế hoạch và phát triển hệ thống bảo vệ nước. Tuy nhiên, việc tính toán chính xác các quá trình trong không gian và thời gian phần lớn trường hợp là không thể được vì tính phức tạp công kênh và thiếu các nghiệm giải tích của phương trình mà nó mô tả sự phân bố nồng độ các thành phần trên kênh sông. Hơn nữa số lượng tham số và phương trình mô tả rất lớn khiến việc tìm kiếm lời giải gặp nhiều khó khăn. Bên cạnh đó rất nhiều công cụ mạnh cho phép tự động hoá tính toán đã được nghiên cứu trên thế giới. Đây là điều kiện thuận lợi cho nghiên cứu ứng dụng giải quyết nhiều bài toán thực tiễn về lan truyền chất. Trong bài báo này trình bày một số kết quả bước đầu ứng dụng phần mềm ANSYS mô phỏng lan truyền chất hoà tan trong kênh sông lấy sông Hương làm đối tượng nghiên cứu.

1. Mở đầu

Sự mô phỏng hệ sinh thái nước bằng công cụ toán học là một nhánh khoa học đang phát triển nhanh, đạt được thành công lớn trong những năm gần đây. Trong thực tế, các thực nghiệm trực tiếp với hệ sinh thái tự nhiên thường gặp khó khăn và trong nhiều trường hợp là không thể cho nên khả năng mô phỏng bài toán môi trường trong phòng thí nghiệm thường rất hạn chế. Các mô hình toán học là công cụ cơ bản cho tính toán định lượng cũng như áp dụng vào thực tế khi nghiên cứu các hệ sinh thái nước.

Các bài toán truyền lan chất ô nhiễm được xác định bởi các hệ phương trình vi phân đạo hàm riêng mô tả các định luật vật lý cơ bản. Các phương trình này mô tả sự di chuyển lưu chất trên kênh sông và sự lan truyền những chất tan khác nhau. Các mô hình liên tục mô phỏng truyền lan chất tan trên kênh sông gồm phương trình Navier Stokes (thành phần thủy động lực học), các phương trình truyền tải khuếch tán. Trong thực tế nhiều kênh sông có chiều dài lớn, thẳng và nước nông cho nên một số thành phần trong phương trình mô tả có thể được rút gọn.

Hiện nay bài toán giải số các mô hình môi trường đang được đặt ra cấp thiết. Một trong những khó khăn chính ở đây là sự thiếu vắng các thuật toán có hiệu quả cũng như không có các phần mềm tính toán tự động. Đây cũng là nguyên nhân buộc nhiều nhóm nghiên cứu phải từ bỏ nhiều thành phần trong mô hình ban đầu bằng cách làm giảm thiểu chúng đi. Trong bài báo này trình bày một cách tiếp cận cho phép khắc phục hiện trạng trên. Phương trình mô tả lan truyền chất trên kênh sông trong dạng tổng quát được giải bằng phương pháp phần tử hữu hạn với sự trợ giúp của phần mềm thương mại nổi tiếng ANSYS (viết tắt của cụm từ tiếng Anh là ANalysis SYStem).

2. Hệ phương trình mô tả lan truyền chất trên kênh sông

Sự biến đổi của chất ô nhiễm trong môi trường nước sau khi được xả thải vào nguồn nước phụ thuộc vào nhiều hệ số hoá học (sự phân huỷ, kết hợp các chất khác, lắng đọng xuống thành trầm tích), vật lý (sự chuyển sang trạng thái khác, sự hấp thụ, tích tụ đồng đặc), thủy động (truyền tải và phân tán trong quá trình khuếch tán rối, sinh học (tích tụ và cuốn đi bởi các sinh vật biển)). Bài toán lan truyền chất ở chế độ dừng trong trường hợp tổng quát được mô tả bởi hệ các phương trình vi phân đạo hàm riêng gồm các phương trình Navier Stokes, phương trình lan truyền, có xét đến sự tương tác lý hoá của chất ô nhiễm với môi trường và sự hiện diện của nguồn chất thải.

Hệ phương trình chuyển động (Navier-Stokes) là

¹ TSKH. Bùi Tá Long, Viện Môi trường và Tài nguyên, 142 Tô Hiến Thành, Q.10, Tp. HCM, E-mail: buita@hcmc.netnam.vn, ĐT. 0918017376.

$$\begin{aligned}
u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \nu_2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \nu_3 \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + f_1 \\
u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu_1 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \nu_2 \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \nu_3 \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + f_2 \\
u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu_1 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \nu_2 \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \nu_3 \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + f_3
\end{aligned}$$

Phương trình liên tục là

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

Phương trình truyền lan chất tan là

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) - \lambda c + W$$

Ở đây các đại lượng chưa biết là: $u(x,y,z)$, $v(x,y,z)$, $w(x,y,z)$ là các thành phần vận tốc dòng chảy; $p(x,y,z)$ trường áp suất trong trạng thái dòng chảy dừng; $c(t,x,y,z)$ nồng độ chất ô nhiễm; ρ mật độ chất lỏng; ν_i hệ số nhớt; f_i thành phần vector ngoại lực; λ tham số phân huỷ chất tan; W nguồn ô nhiễm; D_x , D_y , D_z - hệ số khuếch tán, để đơn giản cho bằng hằng số

Đối với hệ các phương trình kể trên người ta đặt ra các điều kiện biên và điều kiện ban đầu. Ví dụ như vận tốc bằng không trên biên cứng, cho điều kiện trên mặt thoáng, lưu lượng hay gradient áp suất, các điều kiện lên dòng chảy khi đi qua biên, sự phân bố ban đầu của chất cần tính.

Chặt chẽ mà nói thì các tham số của hệ con thủy động (mật độ chất lỏng, độ nhớt của chất lỏng) phải phụ thuộc vào nồng độ chất ô nhiễm. Tuy nhiên trong đại đa số các trường hợp với mục tiêu đơn giản mô hình người ta bỏ qua sự phụ thuộc này, nghĩa là chất ô nhiễm được coi là chất thụ động. Trong các mô hình, ở đó nồng độ của chất ô nhiễm tương đối nhỏ (vì thông thường các hệ sinh thái nước trong thực tế xây ra như thế). Sự đơn giản này hoàn toàn chấp nhận được, khi đó hệ phương trình động học lưu chất sẽ được giải độc lập với phương trình lan truyền chất.

Trong bài báo này xem xét mô hình 2 chiều cho bài toán truyền lan chất tan trên kênh sông. Các phương trình được mô tả gồm:

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \left(\nu_x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \nu_y \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f_1 \quad (1.1)$$

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \left(\nu_x \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \nu_y \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + f_2$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = \left(D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) - \lambda c + W \quad (1.3)$$

Phương trình (1.1) mô tả động học lưu chất của bài toán, trong đó các đại lượng chưa biết là: $u=v(x,y)$ thành phần dọc của vector vận tốc, $v=v(x,y)$ thành phần ngang của vector vận tốc, $p=p(x,y)$ áp

suất, ρ mật độ lưu chất, μ_x, μ_y hệ số nhớt theo phương x và y, $v_x = \mu_x / \rho$, $v_y = \mu_y / \rho$, f_i thành phần vectơ ngoại lực. Ta giả thiết rằng $f_i = 0$.

Phương trình (1.3) mô tả bài toán về phương diện nồng độ, trong đó $c=c(t,x,y)$ là nồng độ của chất tan; D_x và D_y là hệ số khuếch tán; λ là thông số phân huỷ; W là độ lớn nguồn thải

Các phương trình (1.1) – (1.3) được giải bằng phương pháp phần tử hữu hạn với sự trợ giúp của chương trình phần tử hữu hạn ANSYS

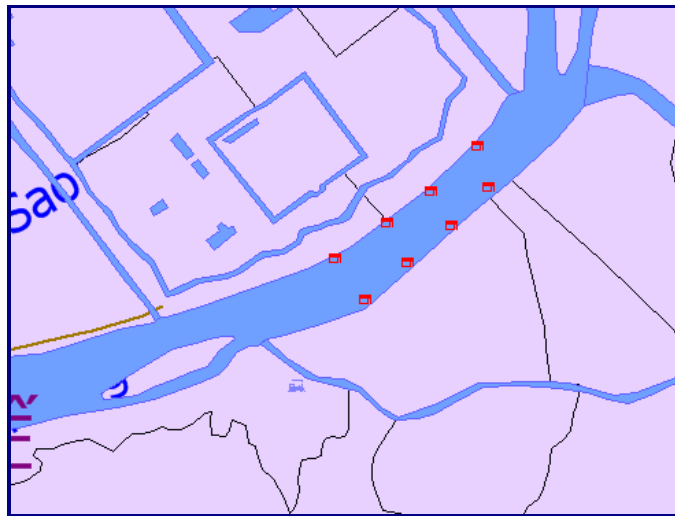
Nghiệm của bài toán trên được chia làm 2 giai đoạn

Bước 1 : Tính trường vận tốc và áp suất

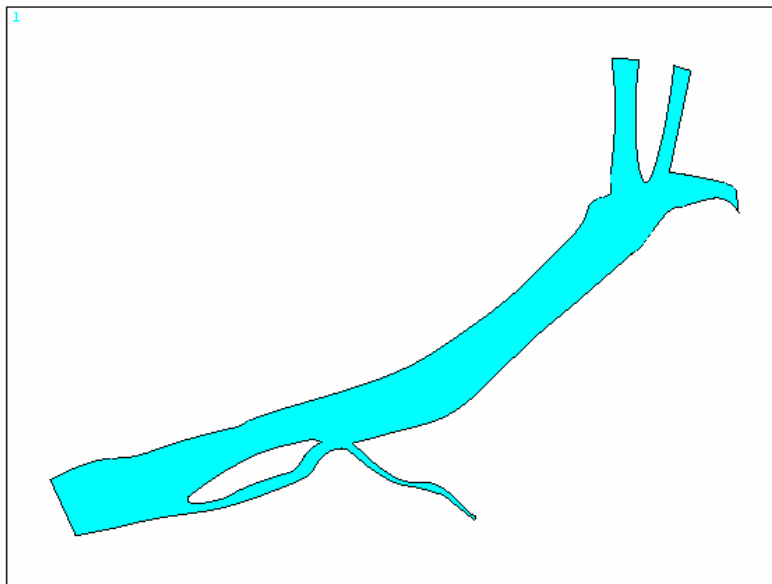
Bước 2 : Tính sự phân bố nồng độ chất ô nhiễm theo trường vận tốc ở bước 1

3. Mô tả bài toán được lựa chọn

Xét bài toán không dùng lan truyền chất lỏng trong mặt phẳng Oxy (mặt phẳng nằm ngang). Miền khảo sát được giới hạn trong hình chữ nhật có kích thước chiều dài là 4500 m, chiều rộng là 3500 m. Trong đó ta khảo sát một khúc sông dài 4700 m, rộng 400 m.



Hình 1. Dữ liệu GIS thể hiện khúc sông Hương được chọn xem xét



Hình 2. Dữ liệu GIS được mã hoá để đưa vào phần mềm ANSYS

Tọa độ của tám công xả là S1(1968,13 ; 601,325), S2(2273,62 ; 731,694), S3(2553,66 ; 910,605), S4(2819,93 ; 1109,59), S5(2489,38 ; 408,736), S6(2757,74; 630,984), S7(3006,05 ; 876,833), S8(3272,17 ; 1103,22). Lượng chất thải đổ vào các công xả được cho bởi Bảng 1.

Bảng 1. Các thông số liên quan tới các công xả thải được chọn tính toán mô phỏng

STT	Tên	Lưu lượng (m ³ /s)	Nồng độ chất thải (mg/l)
1	S1	0.3	2215.7
2	S2	0.2	3226.1
3	S3	0.2	11051.1
4	S4	0.2	12033.38
5	S5	0.3	2454.92
6	S6	0.1	3463.4
7	S7	0.2	3185.8
8	S8	0.3	1266.3

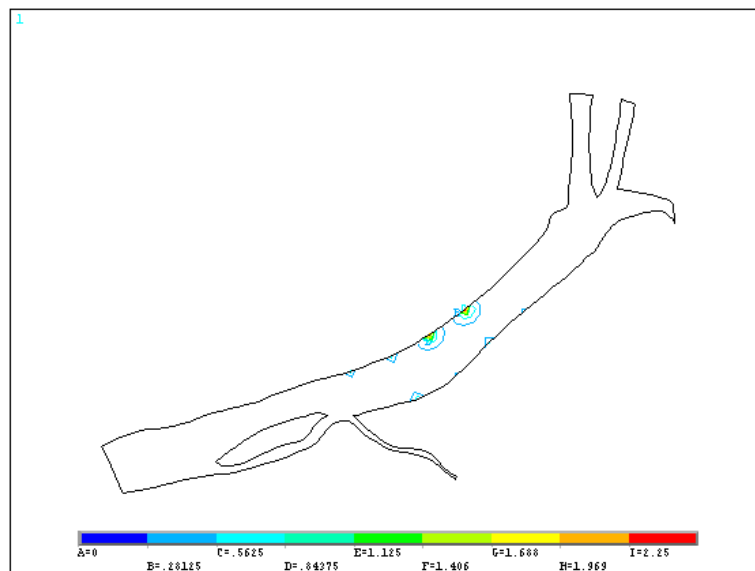
Các tham số tham gia vào mô hình bao gồm:

- Điều kiện kết dính tại hai bên bờ sông là vận tốc bằng không ($V_x = 0$ và $V_y = 0$). Khối lượng riêng của nước là 1000 Kg/m³. Độ nhớt của nước là 0,001 Ns/m²
- Vận tốc dòng chảy của nước trong khoảng 0,1 m/s đến 0,5 m/s . Chảy theo hướng từ trái sang phải và hướng lên trên
- Thời gian xả chất thải từ 10 phút đến 30 phút
- Thời gian khảo sát từ 2 giờ đến 6 giờ.

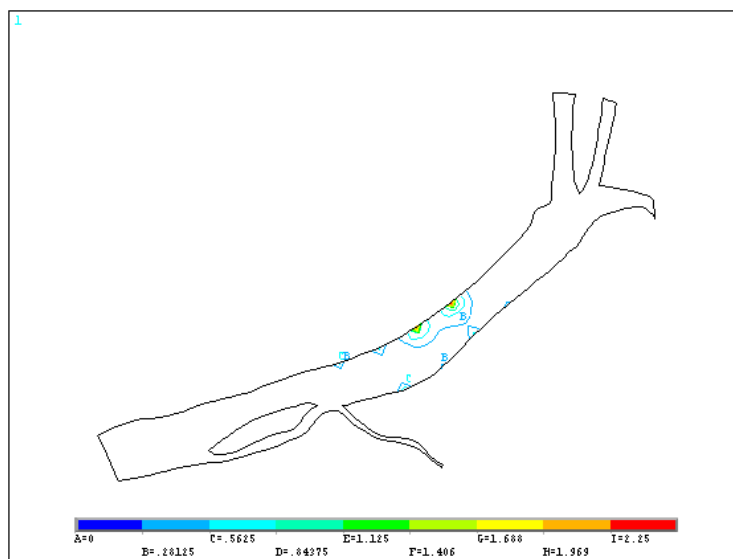
Toàn bộ khúc sông được ANSYS tự động chia làm 3216 phần tử.

Để tính toán theo phương pháp phần tử hữu hạn, ở đây sử dụng phép chia lưới theo các phần tử tứ giác và sử dụng phần tử FLUID141 trong ANSYS. Kích bản được xem xét trong bài báo này là tám nguồn thải cùng xả chất thải trong thời gian 10 phút, sau đó cùng ngưng đồng thời. Tổng thời gian khảo sát là 120 phút, vận tốc dòng chảy của nước trên sông là 0,1 m/s.

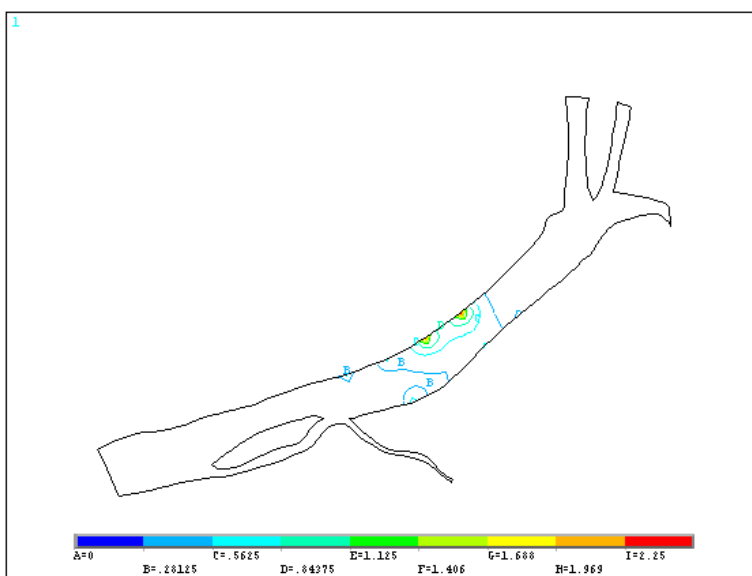
Sau đây là kết quả khảo sát ứng với các thời điểm khác nhau. Các kết quả mà chương trình chạy, được cho qua các hình sau:



Hình 3. Sự phân bố chất thải tại thời điểm 2 phút sau khi xả chất thải , vận tốc dòng nước chảy bằng 0,1 m/s



Hình 4. Sự phân bố chất thải tại thời điểm 4 phút sau khi xả chất thải , vận tốc dòng nước chảy bằng 0,1 m/s



Hình 5. Sự phân bố chất thải tại thời điểm 8 phút sau khi xả chất thải , vận tốc dòng nước chảy bằng 0,1 m/s

4. Kết luận

Trong bài báo này trình bày một cách tiếp cận để giải bài toán môi trường thực tế. Mô hình lan truyền chất được giải kết hợp với mô hình thủy động bằng phương pháp phần tử hữu hạn. Để giải số đã ứng dụng bộ chương trình ANSYS đã được áp dụng thành công tại nhiều nước trên thế giới. Ví dụ được xem xét trong đề tài này là sông Hương với 8 nguồn xả thải nằm ở các vị trí khác nhau. Kết quả của bài báo này mở ra hướng ứng dụng giải quyết các bài toán giám sát chất lượng nước tương ứng.

5. Tài liệu tham khảo

1. Коннор Дж., Бреббиа К. Метод конечных элементов в механике жидкости. Л. – «Судостроение», 1979г., 264с.
2. Гончарова Е.Б.Использование ANSYS при моделировании процессов массопереноса в водоемах. Магистерская диссертация, РГУ, 2002.
3. ANSYS. Basic Analysis Procedures Guide. Rel.10 Ed. P.Koehnke /ANSYS Inc. Houston, 2001г.