CHƯƠNG 4

MÔ HÌNH MỘT CHIỀU VỀ LAN TRUYỀN MẶN TRÊN HỆ SÔNG

Khi xem rằng trong các vùng trữ nước, độ mặn không thay đổi hoặc thay đổi không đáng kể theo thời gian, phương trình mô tả quá trình lan truyền của nước mặn có thể viết lại dưới dạng:

$$\frac{\partial S}{\partial t}+u\frac{\partial S}{\partial x}=D\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}+\frac{1}{A}\frac{\partial AD}{\partial x}\frac{\partial S}{\partial x}+G(S) \qquad (4.1)$$

Trong đó u = Q/A là vận tốc trung bình trên mặt cắt ngang, G(S) = 0 trong trường hợp lấy nước (bơm, tưới), G(S) = q(S_q – S)/A trong trường hợp bổ xung nước với S_q là độ mặn của nguồn nước bổ xung.

Số hạng $\frac{1}{A}\frac{\partial AD}{\partial x}$ thường có cỡ từ 10^{-2} tới 10^{-4} trong khi đó vận tốc u trong dòng triều cỡ 10^{-1} vì thế khi gộp số hạng này với u ta khảo sát định tính phương trình sau đây:

$$\frac{\partial S}{\partial t}+U\frac{\partial S}{\partial x}=D\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \qquad (4.2)$$

với $U=u(1+\varepsilon)=\frac{Q}{A}\left[1-\frac{1}{Q}\frac{\partial AD}{\partial x}\right]$; ε được xem là hệ số hiệu chỉnh.

(4.2) là phương trình loại parabol, ngoài nghiệm chính xác với trường hợp U, D không đổi, các trường hợp còn lại đều được giải bằng các phương pháp số mà phổ biến là các phương pháp sai phân.

4.1. Một số sơ đồ sai phân đối với phương trình tải khuếch tán và vấn đề khuếch tán số của các sơ đồ bằng cách đánh giá sai số xấp xỉ

Ký hiệu các toán tử sai phân L_1 và L_2 theo quy tắc sau:

$$L_1S = \frac{\partial S}{\partial t} \quad ; \quad L_2S = \frac{\partial S}{\partial x}$$

Trong các tài liệu ta thường gặp các sơ đồ sau đây:

4.1.1. Sơ đồ sai phân theo hướng (hay sơ đồ ngược dòng upwind)

Với sơ đồ này các toán tử L_1 và L_2 có dạng:

$$L_2S = \frac{1}{x_{i+1}-x_i}\left[\theta\left(S_{i+1}^{n+1} - s_i^{n+1}\right) + (1-\theta)\left(S_{i+1}^{n} - S_i^{n}\right)\right] \tag{4.3}$$

Nếu $U_i^{n+1} < 0$

$$L_2S = \frac{1}{x_i - x_{i-1}}\left[\theta\left(S_i^{n+1} - s_{i-1}^{n+1}\right) + (1-\theta)\left(S_i^{n} - S_{i-1}^{n}\right)\right] \tag{4.4}$$

nếu $U_i^{n+1} \geq 0$

$$L_1S = \frac{1}{\Delta t}\left(S_i^{n+1} - S_i^{n}\right) \tag{4.5}$$

Bằng cách khai triển Taylor quanh điểm x_i và t_n ta có:

Với $U_i^{\,n+1} < 0$:

$$UL_2S - U\frac{\partial S}{\partial x} = \frac{U}{2}S_{xx}\delta_2 + \frac{U\theta}{2}S_{tx}\Delta t + \frac{U\theta}{3!}S_{ttx}\Delta t^2 + \dots\dots\dots \tag{4.6}$$

Với $U_i^{\,n+1} \geq 0$:

$$UL_2S - U\frac{\partial S}{\partial x} = \frac{U}{2}(S_{xx})\delta_1 + \frac{U\theta}{3!}(S_{ttx})\Delta t^2 + \frac{U\theta}{2}(S_{tx})\Delta t + \dots\dots \tag{4.7}$$

$$L_1S - \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2}(S_{tt})\Delta t + \frac{1}{3!}(S_{ttt})\Delta t^2 + \dots\dots \tag{4.8}$$

Trong đó ký hiệu $\delta_1 = x_i - x_{i-1}$, $\delta_2 = x_{i+1} - x_i$, θ là trọng số thời gian.

4.1.2. Sơ đồ sai phân trung tâm

Trong sơ đồ này các toán tử sai phân L_2S và L_1S được xấp xỉ như sau:

$$L_2S = (x_{i+1} - x_{i-1})^{-1}[\theta(s_{i+1}^{n+1} - s_{i-1}^{n+1}) + (1-\theta)(s_{i+1}^{n} - s_{i-1}^{n})] \tag{4.9}$$

$$L_1S = \frac{1}{\Delta t}[\alpha(S_{i+1}^{n+1} - S_{i+1}^{n}) + (1-2\alpha)(S_i^{n+1} - S_i^{n}) + \alpha(S_{i-1}^{n+1} - S_{i-1}^{h})] \tag{4.10}$$

Trong đó α được gọi là hệ số phân tách. Bằng cách khai triển Taylor các số hạng trong (4.9) và (4.10) quanh điểm x_i, t_n và ký hiệu $x_{i+1} - x_{i-1} = \delta$ ta có:

$$L_1S - \frac{\partial S}{\partial t} = (S_{tt})\frac{\Delta t}{2} + (S_{tx})\frac{\alpha\delta}{2} + (S_{ttt})\frac{\Delta t^2}{3!} + \dots\dots \tag{4.11}$$

$$UL_2S - U\frac{\partial S}{\partial x} = \frac{U}{2}(S_{xx})\delta + \frac{\theta U}{2}(S_{tx})\Delta t + \frac{U\theta}{3!}(S_{ttx})\Delta t^2 + \dots\dots \tag{4.12}$$

Nhận xét: Các số hạng nằm ở vế phải của các công thức (4.6), (4.8), (4.11), (4.12) là các sai số do xấp xỉ các đạo hàm theo x và theo t bằng các toán tử sai phân L_2 và L_1 theo các công thức (4.3),(4.5) và (4.9),(4.10). Đối với các đạo hàm theo x trong phần sai số đều có xuất hiện số hạng dạng $u\delta^* S_{xx}$, trong đó δ^* liên quan tới các bước chia δ_1 , δ_2 , δ_3 . Số hạng này có cùng dạng với số hạng ở vế phải của (4.2). Như vậy nếu trường vận tốc U và lưới chia δ^* sao cho δ^* có cỡ của hệ số D hoặc lớn hơn nhiều lần thì việc xử lý tiếp số hạng bậc hai DS_{xx} trong (4.2) sẽ không còn ý nghĩa hoặc thường nói sơ đồ đưa vào hiện tượng khhuếch tán số làm mất ý nghĩa của quá trình khuếch tán (phân tán) vật lý. Mặt khác trong (4.3) và (4.11) ta thấy có số hạng $\frac{\Delta t}{2} S_{tt}$; chính số hạng này làm cho phương trình chuyển từ dạng parabol sang phương trình sóng, vì thế trong tính toán thường bắt gặp các dao động sóng.

Cũng chú ý rằng trong thực tiễn tính toán lưới δ^* không thể cho tiến tới 0 được, do đó bằng sơ đồ sai phân trung tâm hoặc sơ đồ theo hướng ta đều gặp hiện tượng khuếch tán số. Việc đưa thêm hệ số α sẽ xuất hiện thêm một số số hạng trong sai số, các số hạng này sẽ mất khi cho α = 0, vì thế trong (4.10) chỉ nên lấy ảnh hưởng của điểm i như (4.5), bước thời gian Δt dù nhỏ thì số hạng chứa S_{tt} vẫn còn tại trong sai số cho nên dù Δx và Δt nhỏ ta vẫn gặp hiện tượng khuếch tán số và các dao động sóng. Chi tiết hơn về hiện tượng khuếch tán số đối với phương trình tải có thể xem trong |34, 40|.

Trong (4.9) và (4.10) nếu α = 0, θ = 1 ta có sơ đồ ẩn hoàn toàn của Stone; khi α = 0, θ = 1/2 ta có sơ đồ Crank – Nicolson hay là ứng với cách chọn của sơ đồ Stone – Brian

được sử dụng trong /37/ và được xét trong /40/ .

4.2. Một số tiêu chuẩn đánh giá các sơ đồ số

4.2.1. Một số khái niệm xác suất và đại lượng ngẫu nhiên

Một đại lượng ngẫu nhiên liên tục X có hàm mật độ f(z) thì hàm phân phối của nó tại vị trí x có dạng:

$$F(x) = \int_{-\infty}^{X} f(z)dz \qquad (4.13)$$

Giá trị trung bình của X hay kỳ vọng toán học của nó được định nghĩa như sau:

$$MX = \int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx \qquad (4.14)$$

Đại lượng ngẫu nhiên qui tâm là đại lượng X – MX, ương sai hay mômen bậc hai của nó là đại lượng:

$$X = M[(X - MX)^2] = \int_{-\infty}^{\infty} (x - Mx)^2 f(x)dx \qquad (4.15)$$

Phương sai là đại lượng đặc trưng cho mức độ phân tán anh giá trị trung bình.

2. Khuếch tán từ nguồn có cường độ đơn vị

Nếu chỉ xét quá trình khuếch tán thuần túy từ nguồn tại 0 với cường độ đơn vị với hệ số K = constant, thì phương h (4.2) có dạng (dùng K thay cho D):

$$\frac{\partial S}{\partial t} = K\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}$$

Và nghiệm của nó sẽ là:

$$S(x,t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Kt}}\exp(-\frac{x^2}{4Kt})$$

Có thể thấy giá trị trung bình MS = 0, tức là giá trị trung bình của khoảng cách từ tâm phân bố tới gốc là bằng không, phương sai của phân bố S sẽ là:

$$DS=\overline{X}^2=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{x^2}{\sqrt{4\pi Kt}}\exp(-\frac{x^2}{4Kt})dx=2Kt$$

Và từ đó:

$$K=\frac{1}{2}\frac{d\overline{X}^2}{dt} \qquad (4.16)$$

(4.16) cho độ khuếch tán quanh vị trí nguồn và thường được dùng để đánh giá hệ số khuếch tán trong đo đạc.

Đối với quá trình tải thuần túy hạt lỏng không thay đổ tính chất, do đó với một sơ đồ số bất kỳ áp dụng cho phươn trình tải nếu không có hiện tượng khuếch tán số thì $\overline{X}^2=0$.

4.2.3. Một số tiêu chuẩn đánh giá sơ đồ số

Do ý nghĩa của các đại lượng nêu trong mục 4.2.1 và 4.2.2, do ý nghĩa của hàm phân bố F(∞) = 1, do ý nghĩa c quá trình tải, để khảo sát một sơ đồ số thường xét nó trong q trình tải xung đơn vị và dùng các tiêu chuẩn như sau:

i) Bảo toàn khối lượng

$$M=\int_a^b S(x,t)dx$$

Hoặc ở dạng rời rạc:

$$M=\sum_{i=1}^{N} S(x_i,t)\Delta x_i \qquad (4.17)$$

ii) Bảo toàn vận tốc đối lưu số được biểu diễn qua giá trị trung bình:

$$\overline{X}=\int_a^b xS(x,t)\frac{dx}{M}$$

Hoặc ở dạng rời rạc:

$$\overline{X}=\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{N} x_i S(x_i,t)\Delta x \qquad (4.18)$$

i) Hệ số khuếch tán số bằng không, hệ số này biểu diễn qua ương sai của đại lượng qui tâm (Mô men trung tâm bậc 2).

$$\overline{X}^2=\int_a^b (x-\overline{X})^2 S(x,t)\frac{dx}{M}$$

c ở dạng rời rạc:

$$\overline{X}^2=\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{N}(X_i-\overline{X})^2 S(X_i,t)\Delta_x \qquad (4.19)$$

tốc đối lưu số là đại lượng $\frac{\overline{X}}{\Delta t}$, còn hệ số khuếch tán số g tự với (4.16) là $\frac{1}{2}\frac{\overline{X}^2}{\Delta t}$ đại lượng không âm.

Ngoài những tiêu chuẩn trên, do ý nghĩa của nồng độ, phải là các đại lượng không âm.

Cơ sở của những tiêu chuẩn đưa ra ở trên cũng là cơ sở hương pháp mômen, vì (4.17) – (4.18) và (4.19) là các mômen bậc 0, 1 và 2 của nồng độ. Nội dung của các phương pháp mômen là các mômen tương ứng của nghiệm chính xác và nghiệm số trị phải bằng nhau, tuy nhiên phương pháp này phức tạp.

4.3. Đánh giá tính xấp xỉ của sơ đồ sai phân trung tâm trên cơ sở các tiêu chuẩn bảo toàn

Sơ đồ (4.9) và (4.10) áp dụng cho phương trình tải thuần túy đưa đến hệ sai phân sau (lưới không gian được chia đều với bước thời gian Δx):

$$HS'_{i-1} + GS'_i + FS'_{i+1} = (H+C)S_{i-1} + GS_i + (F-C)S_{i+1} \tag{4.20}$$

trong đó:

$$F = 2\alpha + C\theta \qquad H = 2\alpha - C\theta \qquad G = 2(1-2\alpha) \qquad C = U\frac{\Delta t}{\Delta x} \text{ (Số Courant)} \tag{4.21}$$

S_i' là nồng độ tại x_i và t + Δt , S_i là nồng độ tại x_i , t với $x_i \in [0,L]$ và i = 0, 1 ... , N.

Ta sẽ xét đáp ứng của (4.20) với xung đơn vị đặt tại x = 0, khi đó điều kiện biên và điều kiện đầu như sau:

Điều kiện đầu: S(0,0) =1 , S(x_i , 0) = 0 với i = 1, 2 ... , N

Điều kiện biên: S(0,0) =1 , S'(0 , t) = 0 , S'(N , t) = 0 với t > 0. (4.22)

(4.20) với các điều kiện (4.22) có thể viết lại dưới dạng:

$$\begin{cases} GS'_1 + FS'_2 = H + C \\ HS'_1 + GS'_2 + FS'_3 = 0 \\ \dots\dots\dots \quad \dots\dots\dots \quad \dots\dots\dots \quad \dots \\ HS'_{N-3} + GS'_{N-2} + FS'_{N-1} = 0 \\ HS'_{N-2} + GS'_{N-1} = 0 \end{cases} \tag{4.23}$$

(4.23) là hệ phương trình 3 đường chéo, có thể giải bằng phương pháp khử đuổi sau:

$$S'_{N-i} = p_i S'_{N-i-1} \tag{4.24}$$

trong đó p_i là các hệ số khử đuổi được xác định như sau:

$$p_1 = -H/G; \quad p_{i+1} = -H/(G + p_i F); \quad i = 1,2,3,\dots,N-3$$

$$S'_1 = (H+C)/(G + p_{N-2}F) \tag{4.25}$$

Ta sẽ xét trường hợp U > 0 và do cách chọn ảnh hưởng của các điểm i −1 , i , i + 1 có thể lấy G ≥ 0 hay 0 ≤ θ ≤ 0,5. Để nồng độ luôn luôn dương, từ (4.24) ta phải có $p_i \ge 0$. Từ $p_1 \ge 0$ ta có H ≤ 0 hay α ≤ 0,5.C.θ. Dễ thấy nếu $p_1 = 0$ hay H = 0 thì $p_i = 0$ với i = 2 , ..., N −2 và khi đó S_1' = C / G , S_2' = 0 , ... , S_{N-1}' = 0.

Để bảo toàn khối lượng : S_1' = 1 và ta có hai điều kiện:

$$H = 0 \text{ hay } 2\alpha = C.\theta \qquad S_1' = 1 \text{ hay } 2(1-2\alpha) = C \tag{4.26}$$

Để bảo đảm ổn định tính toán 0,5 ≤ θ ≤ 1 , với giá trị này của θ, từ (4.26) ta có:

Với $\theta = 0,5$: $C = 1$ và $\alpha = 0,25$

Với $\theta = 1$: $C = 2/3$ và $\alpha = 1/3$ (4.27)

Với $\theta = 2/3$: $C = 6/7$ và $\alpha = 2/7$

Như vậy để bảo toàn khối lượng tương ứng với θ và α chọn trước cho sơ đồ thì số Courant chỉ nhận một giá trị nhất định. Trong thực tế tính toán số Courant luôn biến đổi, vì thế không thể đạt được điều kiện bảo toàn khối lượng.

Dễ thấy trong trường hợp này vị trí trung bình của phân bố là $\overline{X} = \Delta x$, và vận tốc đối lưu $\frac{\overline{X}}{\Delta t} = \frac{\Delta x}{\Delta t}$, điều kiện bảo toàn vận tốc đối lưu cho:

$$U = \frac{\Delta x}{\Delta t} \qquad \text{hay} \qquad U\frac{\Delta t}{\Delta x} = C = 1$$

có nghĩa là vận tốc đối lưu chỉ được bảo toàn khi số Courant bằng đơn vị. Cuối cùng phương sai của phân bố nồng độ mặn trong trường hợp này là:

$$\overline{X}^2 = \Delta x^2 - \Delta x^2 = 0$$

Như vậy trong trường hợp hệ số Courant = 1, có thể đạt được bảo toàn khối lượng, bảo toàn vận tốc đối lưu và không có khuếch tán số ($\alpha = 0,25$, $\theta = 0,5$); chú ý rằng ta xem p_1 = 0, tức là nồng độ chưa lan tới biên dưới. Nếu p_1 khác 0 thì bài toán trở nên phức tạp. Xét trường hợp đoạn L chia làm 3 đoạn từ (4.23) ta có:

$$GS_1' + FS_2' = H + C$$

$$HS_1' + GS_2' = 0$$

Từ hai phương trình này suy ra:

$$S_1' = \frac{G(H+C)}{G^2 - FH} \qquad S_2' = \frac{-H(H+C)}{G^2 - FH}$$

Chú ý : Để nồng độ dương phải có $H \le 0$, khối lượng của phân bố này sẽ là :

$$M = \frac{(C-H)(H+C)}{G^2 - FH} \qquad (4.28)$$

Vị trí trung bình:

$$\overline{X} = \frac{1}{M}\left(\sum_{i=1}^{2} i.S_i'.\Delta x\right) = \frac{(G-2H)\Delta x}{G-H} \qquad (4.29)$$

Phương sai:

$$\overline{X}^2 = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{2} i.^2 S_i'.\Delta x^2 - \overline{X}^2 = \frac{-\Delta x^2 GH}{G-H} \qquad (4.30)$$

Từ (4.30) rõ ràng sơ đồ chỉ không có khuếch tán số nếu ...ặc G hoặc H = 0, ngoài ra ta luôn luôn gặp hiện tượng ...uếch tán số.

Để bảo toàn vận tốc đối lưu từ (4.29) ta có:

$$G - 2H = (B - H)C \qquad (4.31)$$

Và để bảo toàn khối lượng từ (4.28) ta suy ra:

$$(G - H)(H + C) = G^2 - FH \qquad (4.32)$$

Dễ thấy điều kiện (4.31) và (4.32) không đồng thời thực ... Từ những phân tích trên cho thấy sơ đồ sai phân trung ... không loại được khuếch tán số và không đồng thời bảo ... được khối lượng và vận tốc đối lưu. Trường hợp số

Courant bằng đơn vị là trường hợp duy nhất mà các tiêu chuẩn trên được thực hiện nhưng chỉ với $\alpha = 0{,}25$ và $\theta = 0{,}5$.

Xét trường hợp $\alpha = 0$, $\theta = 1/2$ tương ứngvới sơ đồ Crank – Nicolson, từ (4.28) ta có:

$$M = \frac{(4+C)C}{16+C^2} \qquad \text{Để } M = 1 \text{ thì } C = 1{,}757$$

Từ (4.29) ta có:

$$\overline{X} = \frac{2(2+C)\Delta x}{4+C} \qquad \text{Để } \frac{\overline{X}}{\Delta t} = 4C \quad \text{thì } C = 1{,}236$$

Và phương sai:

$$\overline{X}^2 = \frac{2C.\Delta x^2}{4+C} \qquad \text{Để } \frac{1}{2}\frac{\overline{X}^2}{\Delta t} = 0 \text{ chỉ có thể } \Delta x = 0 \text{ hoặc } C = 0$$

Những phân tích ở trên cho thấy sơ đồ sai phân nói chung và đặc biệt là sơ đồ sai phân trung tâm không bảo đảm đồng thời không khuếch tán số và bảo toàn khối lượng.

4.4. Phương pháp phân rã để giải phương trình tải khuếch tán

4.4.1. Nội dung của phương pháp phân rã

Theo /39/ việc giải phương trình

$$\frac{\partial S}{\partial t} + u\frac{\partial S}{\partial x} + \sigma S = \frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(DA\frac{\partial S}{\partial x}\right) \qquad (4.33)$$

trong một bước thời gian Δt được đưa về giải liên tiếp hai bài toán:

Bài toán 1:

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} + u\frac{\partial S_1}{\partial x} + \sigma S_1 = 0 \qquad (4.34)$$

$$S_1 = S \text{ khi } t = t_n \qquad (4.34a)$$

Bài toán 2:

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} = \frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(DA\frac{\partial S_2}{\partial x}\right) \qquad (4.35)$$

$$S_2 = S_1^{n+1} \qquad (4.35a)$$

Sau khi giải bài toán (4.34) với điều kiện đầu (4.34a) sẽ tìm được $S_1^{n+1} = S_1(x, t_{n+1})$ sau khi giải bài toán (4.35) với điều kiện đầu (4.35a) sẽ tìm được $S_2^{n+1} = S_2(x, t_{n+1})$ và đó chính là nghiệm xấp xỉ của bài toán (4.33) sau một bước thời gian Δt. Chú ý rằng nghiệm của bài toán 1 là điều kiện đầu cho bài toán 2. Bằng cách tích phân (4.34) và (4.35) từ t_n đến t_{n+1} , sử dụng các điều kiện (4.34a) và (4.35a) dễ dàng chỉ ra rằng khi $\Delta t \to 0$ ta có:

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} + u\frac{\partial S_2}{\partial x} + \sigma S_2 = \frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(DA\frac{\partial S_2}{\partial x}\right)$$

Điều này có nghĩa S_2 là nghiệm của (4.33).

4.4.2. Điều kiện biên trong phương pháp phân rã

Dưới đây sẽ đề cập tới một cách cho điều kiện biên đối với (4.2) khi có thêm số hạng tự do f:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + u\frac{\partial S}{\partial x} = D\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + f \qquad (4.2)'$$

Với t > 0 , D > 0 , x ∈ [0 ,1] , f là hàm đã biết cùng với điều kiện đầu và điều kiện biên sau đây:

$$S(0,t) = a(t), \quad S(1,t) = b(t), \quad S(x,0) = g(x) \qquad (4.36)$$

(4.2)' sẽ được phân rã thành:

$$\begin{cases} \psi_t + u\psi_x = 0 \\ \psi^n = S^n \\ \text{Và điều kiện biên} \end{cases} \qquad (4.37)$$

$$\begin{cases} \varphi_t - D\varphi_{xx} = f_1 \\ \varphi^n = \psi^{n+1} \\ \text{Và điều kiện biên} \end{cases} \qquad (4.38)$$

Vấn đề đặt ra là chọn điều kiện biên của (4.37) và (4.38) và hàm f_1 sao cho chúng có quan hệ với a(t), b(t) và f để nghiệm của (4.38) là nghiệm xấp xỉ của (4.2)'.

Xem rằng u > 0 và phân đoạn [0,1] thành N đoạn chiều dài h, ký hiệu:

$$\tau = \Delta t \quad ; \quad A = u\frac{\partial}{\partial x} - D\frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad ; \quad f_2^n = f_1\left(x, n + \frac{1}{2}\right)$$

Sử dụng phương pháp Crank – Nicolson cho (4.2)' ta được:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + A\frac{S^{n+1} + S^n}{2} = f_2^n \qquad (4.39)$$

Thế các giá trị biên $S_0^n = a^n$ và $S_N^n = b^n$ vào (4.39) ta có phương trình ở dạng ma trận như sau:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + L\frac{S^{n+1} + S^n}{2} = F^n \qquad (4.40)$$

Trong đó các giá trị biên đã được chuyển vào vế phải, các ma trận L và F có dạng:

$$L = \begin{bmatrix} \frac{u}{h} + \frac{2D}{h^2} & -\frac{D}{h^2} \ldots\ldots\ldots & 0 \ldots\ldots\ldots & .0 \\ -(\frac{u}{h} + \frac{D}{h^2}) & \frac{u}{h} + \frac{2D}{h^2} & -\frac{D}{h^2} \ldots\ldots\ldots & 0 \\ \ldots\ldots 0 \ldots\ldots\ldots & .0 \ldots\ldots & -(\frac{u}{h} + \frac{D}{h^2}) & \frac{u}{h} + \frac{2D}{h^2} \end{bmatrix}$$

$$F^n = \begin{bmatrix} f_{21}^n + \left(\frac{u}{h} + \frac{D}{h^2}\right)\frac{a^{n+1} + a^n}{2} \\ .. \\ f_{2i}^n \\ . \\ f_{2,N-1}^n + \frac{D}{h^2}\left(\frac{b^{n+1} + b^n}{2}\right) \end{bmatrix}$$

Bởi vì ma trận L có thể phân thành L_1 , L_2 và dễ thấy L_1 , tương ứng với luật sai phân của các số hạng $u\frac{\partial}{\partial x}$ và $D\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ gồm cả xử lý điều kiện biên.

Từ (4.40) sẽ có:

$$S^{n+1} = (E - \tau L + \frac{\tau^2}{2}L^2)S^n + (E - \frac{\tau}{2}L)\tau F^n + o(\tau^3) \qquad (4.41)$$

Trong đó E là ma trận đơn vị và đã sử dụng khai triển sau đây:

$$(E+\frac{\tau}{2}L)^{-1} = E-\frac{\tau}{2}L+\frac{\tau^2}{4}L^2+o(\tau^3) \qquad (4.42)$$

Xét sơ đồ sau đây:

$$\frac{S^{n+1/2}-S^n}{\tau}+L_1\frac{S^{n+1/2}+S^n}{2}=Bg^{(1)} \qquad (4.43)$$

$$\frac{S^{n+1}-S^{n+1/2}}{\tau}+L_1\frac{S^{n+1}+S^{n+1/2}}{2}=Rg^{(2)}$$

Các toán tử B, R và các hàm $g^{(1)}$ và $g^{(2)}$ sẽ được xác định sau.

Từ (4.43) dùng khai triển (4.42) với một số biến đổi sẽ được:

$$S^{n+1}=\left\{E-\tau(L_1+L_2)+\frac{\tau^2}{2}\left[(L_1+L_2)^2-L_1L_2+L_2L_1\right]\right\}S^n + \qquad (4.44)$$

$$\left[E-\frac{\tau}{2}(L_1+L_2)\right]\tau Bg^{(1)}+\left[E-\frac{\tau}{2}(L_2+L_1)\right]\tau Rg^{(2)}+O(\tau^3)$$

So sánh các số hạng tương ứng của (4.44) và (4.41) sẽ có :

$$F^n = Bg^{(1)}+Rg^{(2)}$$

Lưu ý rằng ở đây ta đã xem L_1 và L_2 có thể giao hoán được. Bây giờ ta xác định B, R, $g^{(1)}$ và $g^{(2)}$ sao cho việc sử dụng điều kiện biên là dễ dàng nhất. Nếu đồng nhất $B \equiv R \equiv E$ và:

$$g^{(1)}=\begin{bmatrix}\frac{u}{h}\frac{a^{n+1}+a^n}{2}\\ 0\\ \bullet\\ 0\end{bmatrix} \quad ; \quad g^{(2)}=\begin{bmatrix}\frac{D}{h^2}\frac{a^{n+1}+a^n}{2}\\ 0\\ \bullet\\ \frac{D}{h^2}\frac{b^{n+1}+b^n}{2}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}f^n_{21}\\ f^n_{22}\\ f^n_{23}\\ \bullet\\ \bullet\\ f^n_{2,N-1}\end{bmatrix}$$

Với cách chọn như vậy các bài toán (4.37) và (4.38) sẽ là:

$$\begin{cases}\psi_t+u.\psi_x=0\\ \psi^n=S^n\\ \psi(0,t)=a(t)\end{cases} \quad (4.37)' \qquad \begin{cases}\varphi_t-D.\varphi_{xx}=f\\ \varphi^n=\varphi^{n+1}\\ \varphi(0,t)=a(t)\\ \varphi(1,t)=b(t)\end{cases} \quad (4.38)'$$

Kết quả trên đây xét cho u > 0, nếu u < 0 hoặc u thay đổi dấu có thể ứng dụng các thủ tục tương tự . Trong trường hợp này đối với (4.37)' nếu tại u (0,t) > 0 thì phải cho $\Psi(0,t) = a(t)$ còn tại mút cuối u(1,t) < 0 thì phải cho $\Psi(1,t) = b(t)$.

Như vậy trong bài toán phân rã ta có thể sử dụng các điều kiện biên của bài toán xuất phát với các sai số như sai số của sơ đồ được sử dụng cho bài toán xuất phát.

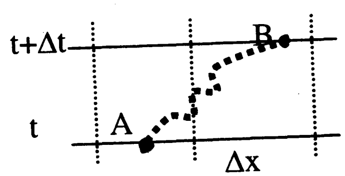
4.3. Thực nghiệm số trong việc giải phương trình tải thuần túy

Như đã nêu ở mục 4.1 và mục 4.3, các sơ đồ sai phân được xét với phương trình tải đều gây ra khuếch tán số và không đồng thời bảo toàn được khối lượng và vận tốc đối lưu, vì vậy cần chọn một phương pháp số nào đó giải phương trình tải để loại trừ tối đa khuếch tán số và như vậy giữ được ý nghĩa của số hạng tán xạ. Như nêu trong /7/ việc sử dụng phương pháp phân rã là cách hợp lí, vấn đề là tìm sơ đồ số cho phương trình tải.

4.4.3.1. Phương pháp đặc trưng giải phương trình tải

Theo quan điểm Lagrange có thể xét bài toán tải như sau:

Một hạt lỏng ở thời điểm t nằm tại điểm A, với vận tốc u hạt lỏng sẽ dịch chuyển theo một quỹ đạo nào đó để đạt tới điểm B tại thời điểm t + Δt (xem hình dưới). Trong quá trình tải thuần túy hạt lỏng không thay đổi, mật độ tại B sẽ bằng mật độ tại A: $S(B, t + \Delta t) = S(A, t)$



Như vậy để xác định được nồng độ tại điểm B chỉ cần đi ngược lại quỹ đạo tới điểm A, tại đây ta đã biết nồng độ (nồng độ tại A được biết trước hoặc biết qua các điểm lân cận). Quá trình vừa mô tả là nội dung của phương pháp đường đặc trưng đối với phương trình tải. Trong phương pháp đặc trưng có hai bước cần tiến hành:

- Xác định chân đường đặc trưng A.
- Nội suy giá trị tại A qua các giá trị đã biết.

Độ chính xác của phương pháp đường đặc trưng phụ

thuộc vào độ chính xác của hai bước này. Dưới đây sẽ trình bày những nét chính đã được cải biên của thuật toán trình bày trong /24/.

Phương trình xuất phát:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + U(x,t)\frac{\partial f}{\partial x} + \sigma f = 0 \quad ; \quad \sigma \geq 0 \qquad (4.45)$$

Để đơn giản trước tiên xét với $\sigma = 0$ với $x \in [x_1, x_N]$ và $t > 0$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + U(x,t)\frac{\partial f}{\partial x} = 0 \qquad (4.45a)$$

Điều kiện đầu : $f(x,0) = f_0(x)$

Điều kiện biên : $f(x_1,t) = f_1(t)$ nếu $U(x_1,t) \geq 0$

$f(x_N,t) = f_2(t)$ nếu $U(x_N,t) < 0$

(4.45a) có họ đặc trưng $dx = Udt$ và hệ thức trên đặc trưng cho $df = 0$.

Giả thiết: Trong khoảng tích phân Δt , U chỉ là hàm của x, giá trị của U được cho tại các điểm $x_1, x_2, \ldots, x_N$; giữa các khoảng $[x_i, x_{i+1}]$, U được xem như một hàm tuyến tính $U = ax + b$.

Hàm f(x, t) tại lớp thời gian t_n được cho tại các điểm $x_1, x_2, \ldots, x_N$, giữa các điểm $[x_i, x_{i+1}]$ hàm f được xấp xỉ bằng một phép nội suy kết hợp tuyến tính và parabol tùy theo độ dốc của hàm f, hoặc được nội suy bằng một hàm spline bậc 3.

Thuật toán số: Do U không phụ thuộc t (trong một bước) cho nên trong mỗi khoảng $[x_k, x_{k+1}]$ các đường cong tích phân $dx = U(x)dt$ đều song song:

$$\delta t = \frac{\Delta x}{U(x)} = const$$

Cho nên để xác định chân đặc trưng chỉ cần tính δt đối với từng khoảng $[x_k , x_{k+1}]$, sau đó kiểm tra điều kiện:

$$\sum_{i=1}^{K} \delta t_i > \Delta t$$

Nếu điều kiện này được thực hiện tức là đặc trưng đã cắt đường thẳng $t = t_n$.

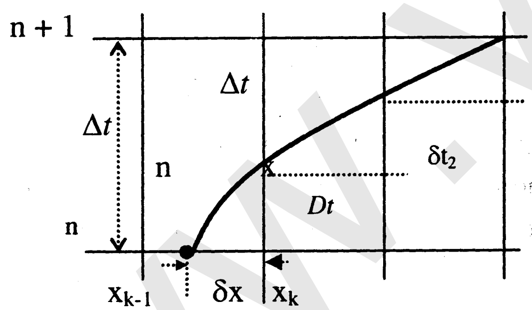
Khi đó tính $$Dt = \Delta t - \sum_{i=1}^{K-1} \delta t_i$$

Tính δt và δx:

Gọi $\varepsilon = \pm 1 = -\operatorname{sign}(U_k)$, trong khoảng x_k và $x_{k+\varepsilon}$ hàm U có dạng:

$$U(x) = ax + b$$

$$a = \frac{U_{k+\varepsilon} - U_k}{\varepsilon \Delta x}; \; b = U_k \left(1 + \frac{x_k}{\varepsilon \Delta x}\right) - U_{k+\varepsilon} \frac{x_k}{\varepsilon \Delta x}$$



Hình 11:

Tích phân phương trình dx = U(x)dt trong khoảng $[x , x_k]$:

$$\int_x^{x_k} \frac{dx}{ax+b} = \int_t^{\tau} dt$$

Từ đó:

$$\frac{1}{a} \ln \frac{|ax + b|}{|ax_k + b|} = t - \tau$$

Vì $ax_k + b = U_k$ và x đủ gần x_k để U = ax + b có cùng dấu của U_k cho nên:

$$ax + b = U_k e^{a(t-\tau)}$$

Hoặc: $a(x - x_k) = U_k (e^{a(t-\tau)} - 1)$ (4.46)

Hoặc : $a(t-\tau) = \log\left(\frac{a(x-x_k)}{U_k} + 1\right)$ (4.47)

a) Nếu τ - t = Dt cho trước, từ (4.46) sau khi khai triển ta có:

$$\delta x = -U_k Dt \left[1 + \frac{U_{k+\varepsilon} - U_k}{2\varepsilon \Delta x} Dt \right] \quad (4.48)$$

b) Nếu $x - x_k = \varepsilon\Delta x$ cho trước (đặc trưng rơi vào hoặc cắt các điểm chia). Từ (4.47) suy ra:

$$\delta t = \tau - t = -\frac{1}{a} \log\left[\frac{a(x - x_k)}{U_k} + 1\right] \quad (4.49)$$

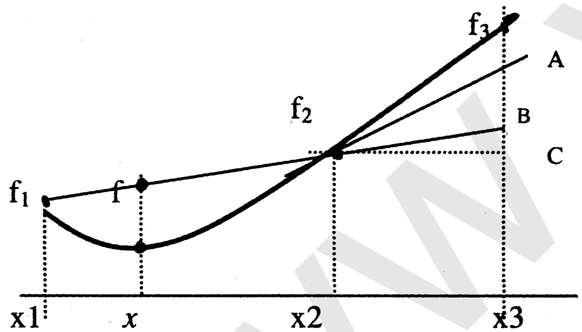
(4.48) và (4.49) là hai công thức cơ bản để xác định chân đường đặc trưng. Khi đặc trưng chưa cắt đường $t = t_n$ thì công thức (4.49) được dùng để tính δt_i của từng khoảng $[x_i , x_{i+1}]$, khi đặc trưng đã cắt đường $t = t_n$ thì công thức (4.48) được dùng để xác định δx (Hình 11). Chú ý rằng trên mỗi khoảng $[x_i , x_{i+1}]$ đường đặc trưng là đường cong lôga xác định bởi (4.49) chứ không phải là đường thẳng.

Trong thực tế tính toán vận tốc U sẽ được lấy trung bình giữa hai lớp thời gian t và t+Δt. Trong SAL vận tốc được xác định qua trọng số θ theo công thức: $U = \theta U^{n+1} + (1-\theta)U^{n}$. Đây là điểm cải tiến so với /24/.

Để xác định f(x) qua giá trị tại $f(x_k)$ và $f(x_{k+\varepsilon})$ ta dùng phương pháp nội suy sau đây:

✧ Nội suy tuyến tính kết hợp với nội suy bậc hai Lagrange (parabol):

Gọi f_p là kết quả của phép nội suy Lagrange, f_d là kế[t] quả của phép nội suy tuyến tính, t_p là độ dốc của tiếp tuyến đ[ối] với parabol, t_d là độ nghiêng của đường thẳng. Nếu hiệu đ[ộ] nghiêng về giá trị tuyệt đối lớn hơn *n* lần giá trị tuyệt đối đ[ộ] nghiêng của đường thẳng thì f(x) = f_d, nếu không f(x) = f_p. Trong đó *n* là một số cho trước, trong tính toán n = 0,55. Hì[nh] 12 minh họa điều vừa giải thích.



Hình 12:

Điểm *x* là điểm cần tìm giá trị nội suy của hàm f qua các giá trị đã biết f_1, f_2, f_3.

Hàm nội suy bậc 2 qua ba giá trị f_1, f_2, f_3 có dạng $y = ax^2 + bx + c$. Khi đó $t_p = y'(x_2)$.

t_d là hệ số góc của đường thẳng qua x_1 và x_2 nếu $x_1 < x < x_2$ hoặc qua x_2 và x_3 nếu $x_2 < x < x_3$.

$$\left|\frac{(t_p - t_d)}{t_d}\right| = \left|\frac{CA - CB}{CB}\right| = \left|\frac{BA}{CB}\right|$$

Như vậy nếu: $\left|\frac{BA}{CB}\right| > n$ thì nội suy tuyến tính và nếu $\left|\frac{BA}{CB}\right| < n$ thì nội suy parabol. Điều đó có nghĩa là trên đoạn [c]hứa x nếu đường nội suy tuyến tính và parabol gần nhau thì [dùng] nội suy parabol (hoặc nếu đường cong quá dốc thì dùng nội [su]y tuyến tính để tránh giá trị nội suy vượt khỏi giá trị max, [mi]n trong khoảng nội suy).

Nội suy dùng hàm Spline bậc 3.

Nếu gọi $R_1, R_2, \ldots, R_N$ là đạo hàm bậc hai của hàm f tại [các] điểm $x_1, x_2, \ldots, x_N$. Một điểm x nào đó nằm giữa x_1 và x_2 [gi]á trị f(x) được nội suy qua f_1, f_2 và R_1, R_2 như sau:

$$f(x) = R_1\frac{(x_2 - x)^3}{6(x_2 - x_1)} + R_2\frac{(x - x_1)^3}{6(x_2 - x_1)}$$

$$+ f_1 - \frac{R_1(x_2 - x_1)^2}{6}\frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} + f_2 - \frac{R_2(x_2 - x_1)^2}{6}\frac{x - x_1}{x_2 - x_1}$$

[Tr]ong hai phương pháp nội suy nói trên, phương pháp nội suy dùng hàm Spline cho độ chính xác cao hơn và chỉ cần dùng tới hai điểm để nội suy, tuy nhiên phải biết thêm các giá trị đạo hàm bậc hai, vì thế phải cần thêm một số tính toán. Cách nội suy tuyến tính kết hợp với parabol tuy cần tới ba điểm để nội suy nhưng số lượng tính toán ít hơn và cũng đạt độ chính xác cần thiết theo quan điểm thực hành. Trong mục dưới sẽ cho ví dụ minh họa về độ chính xác của hai phương pháp nội suy này.

4.4.3.2. So sánh các sơ đồ số khi giải phương trình tải.

Để so sánh độ chính xác của các sơ đồ số, ta xét ví dụ sau:

Xét phương trình $\frac{\partial f}{\partial t} + u(x,t)\frac{\partial f}{\partial x} = 0$ với x ∈ (0,1) và t > 0.

Trong đó $u(x,t) = \pi a(\frac{1-2x}{1-2a\sin\pi t})\cos\pi t$;

(Sẽ xét trường hợp a = ¼)

Điều kiện đầu : f(x,0) = 3sin (4πx)

Điều kiện biên: $f(0,t) = -3\sin(4\pi\frac{a\sin\pi t}{1-2a\sin\pi t}$

$$f(1,t) = 3\sin(4\pi\frac{1-a\sin\pi t}{1-2a\sin\pi t})$$

Nghiệm chính xác của bài toán này là:

$$f(x,t) = 3\sin(4\pi\frac{x-a\sin\pi t}{1-2a\sin\pi t})$$

Chia đoạn (0,1) thành 41 đoạn đều nhau với Δx = 1/41 v
lấy Δt = 1,5/41.

Ký hiệu được dùng trong bảng 4 dưới đây:

F : Nghiệm chính xác của bài toán

f_L : Lời giải số bằng phương pháp đặc trưng, sử dụng nội suy tuyến tính kết hợp với nội suy Lagrange.

f_S : Lời giải số bằng phương pháp đặc trưng với nội suy Spline bậc 3.

f_H (f_{H1}, f_{H2}) : Lời giải số bằng phương pháp sai phân theo hướng.

f_T (f_{T1},f_{T2}): Lời giải số bằng sai phân trung tâm.

Bảng 4.1: So sánh lời giải số và lời giải chính xác đối với phương trình tải.

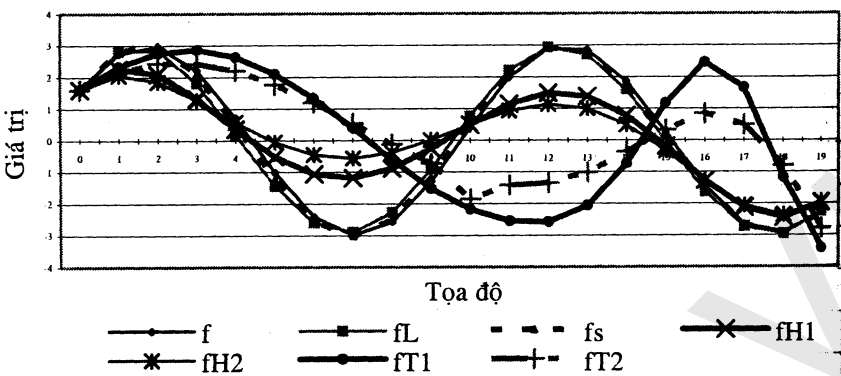
Trường hợp α = 1/6 (trong (4.10)), t = 0,4024, x_i = i / 41

Hàm / Tọa độ i	f	f_L	f_S	f_H : (f_{H1}, f_{H2})		f_T : (f_{T1},f_{T2})	
				θ = 0,6	θ = 1	θ = 0,6	θ = 1
0	1.592	1.592	1.592	1.592	1.592	1.592	1.592
1	2.732	2.815	2.831	2.261	2.049	2.323	2.145
2	2.962	2.833	2.986	2.086	1.844	2.753	2.424
3	2.204	1.802	2.094	1.315	1.263	2.86	2.42
4	0.711	0.186	0.501	0.351	0.561	2.633	2.194
5	-1.019	-1.451	-1.241	-0.518	-0.057	2.097	1.754
6	-2.409	-2.596	-2.556	-1.07	-0.454	1.325	1.193
7	-2.996	-2.897	-3.024	-1.192	-0.56	0.39	0.53
8	-2.584	-2.276	-2.507	-0.888	-0.382	-0.614	-0.118
9	-1.311	-0.919	-1.186	-0.267	0.012	-1.527	-0.728
10	0.399	0.76	0.516	0.485	0.498	-2.191	-1.864
11	1.976	2.209	2.051	1.143	0.923	-2.554	-1.418

12	2.894	2.937	2.914	1.491	1.128	-2.582	-1.349
13	2.848	2.704	2.816	1.378	0.996	-2.064	-1.018
14	1.852	1.595	1.792	0.776	0.484	-0.734	-0.359
15	0.239	-0.026	0.177	-0.196	-0.339	1.167	0.325
16	-1.454	-1.64	-1.497	-1.283	-1.283	2.456	0.841
17	-2.662	-2.732	-2.679	-2.14	-2.062	1.661	0.48
18	-2.903	-2.962	-2.979	-2.445	-2.364	-1.187	-0.806
19	-2.309	-2.256	-2.298	-1.989	-1.955	-3.417	-2.786

Kết quả trong bảng 4.1 được biểu diễn đồ thị trên hình 13 dưới đây:

Hình 13: So sánh các phương pháp nội suy



Từ kết quả thực nghiệm số với các bước thời gian khác nhau (bảng 4.1 chỉ là cho một ví dụ) cho thấy:

✧ Phương pháp đặc trưng với cả hai cách nội suy đều cho kết quả khá chính xác.

✧ Các phương pháp sai phân đều bị khuếch tán số. Sơ đồ sai phân trung tâm cho các kết quả sai lạc cả về biên độ và pha. Sơ đồ sai phân theo hướng làm thay đổi biên độ nhưng giữ được pha dao động.

Những tính toán cho các bài toán thực tiễn khác nhau đều khẳng định những nhận xét trên.

4.4.4. Phương pháp số cho phương trình khuếch tán thuần túy

Gray và Pinder /26/ đã chỉ ra rằng nếu quá trình khuếch tán là tương đối mạnh thì hầu hết các phương pháp số đều cho các kết quả thỏa mãn, vì thế với phương trình khuếch tán thuần túy:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = K\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - \sigma S + \varphi \qquad (4.50)$$

trong đó : khi $q > 0 : \sigma = q/A > 0, \varphi = qC_q/A$

Khi $q \le 0 : \sigma = 0 \quad , \varphi = 0$

(Chú ý rằng số hạng σS có thể chuyển sang phương trình tải thuần túy)

Ta dùng sơ đồ sau đây:

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \approx \frac{2\theta(S_{i+1}^{n+1} - S_i^{n+1}) + 2(1-\theta)(S_{i+1}^n - S_i^n)}{\delta\delta_2} - \frac{2\theta(S_i^{n+1} - S_{i-1}^{n+1}) + 2(1-\theta)(S_i^n - S_{i-1}^n)}{\delta\delta_1}$$

$$\sigma S \approx [\theta S_i^{n+1} + (1-\theta) S_i^n]\sigma \; ; \quad \frac{\partial S}{\partial t} \approx \frac{S_i^{n+1} - S_i^n}{\Delta t}$$

với $\delta_1 = x_i - x_{i-1}$, $\delta_2 = x_{i+1} - x_i$, $\delta = \delta_1 + \delta_2$

Thay vào (4.50) và sau khi rút gọn ta được hệ phương trình 3 đường chéo sau đây:

$$M_i S_{i-1}^{n+1} + N_i S_i^{n+1} + L_i S_{i+1}^{n+1} = P_i \qquad (4.51)$$

Với i = 2, 3, ... , N − 1

$$M_i = \frac{2K\,\theta K\,\Delta t}{\delta_1}; \quad L_i = \frac{2K\,\theta\Delta t}{\delta_2}$$

$$N_i = -\left(1 + \frac{2K\,\theta\,\Delta t}{\delta_1\delta_2} + \sigma\theta\,\Delta t\right)$$

$$P_i = \frac{2K\Delta t(\theta-1)}{\delta_1\delta}S_{i-1}^n - \Big[1 - \sigma\Delta t(1-\theta) - \frac{2K\Delta t(1-\theta)}{\delta_1\delta_2}\Big]S_i^n + \frac{2K\Delta t(\theta-1)}{\delta_2\delta}S_{i+1}^n - \varphi_i\Delta t$$

Để giải (4.51) cần biết điều kiện tại hai đầu biên S_1^{n+1} và S_N^{n+1} và các giá trị ban đầu S_1^n, S_2^n, ... ,S_N^n. Các giá trị này lấy từ nghiệm của phương trình tải thuần túy.

(4.51) là hệ phương trình 3 đường chéo, có thể giải bằng phương pháp khử đuổi. Hệ này đã được nghiên cứu trong nhiều tài liệu, chẳng hạn /10/.

4.4.5. Thực nghiệm số khi giải phương trình tải khuếch tán

Để khảo sát độ chính xác của phương pháp phân rã, ta làm một thực nghiệm số giải phương trình sau đây:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u(x,t)\frac{\partial f}{\partial x} = K\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \sigma f \qquad (4.52)$$

Trong đó:

$$u(x,t) = \pi\frac{0.5-x}{2-\sin\pi t}\cos\pi t\,; \quad x \in [0,1]\ ,\ t > 0;$$

$f(x,o) = 3\sin\pi x$

$$f(1,t) = 3\sin\Big(2\pi\frac{4-\sin\pi t}{2-\sin\pi t}\Big)$$

$$f(0,t) = -3\sin\Big(2\pi\frac{\sin\pi t}{2-\sin\pi t}\Big)$$

$$\sigma = \frac{64K\pi^2}{(2-\sin\pi t)^2}$$

Với các điều kiện trên, (4.52) có nghiệm chính xác:

$$f(x,t) = 3\sin\Big(2\pi\frac{4x-\sin\pi t}{2-\sin\pi t}\Big)$$

Chú ý rằng với trường hợp trên vận tốc u(x,t) có dạng dao động theo thời gian, vì thế gần với quá trình thực.

Để giải (4.52) ta dùng phép phân rã sau:

$$\begin{cases} f_t + u(x,t)f = 0 \\ f(0,t) \\ f(1,t) \\ f(x,0) \end{cases} \quad (4.53) \qquad \begin{cases} \psi_t = K\psi_{xx} - \sigma\psi \\ \psi(0,t) = f(0,t) \\ \psi(1,t) = f(1,t) \\ \psi(x,0) = f(x,t) \end{cases} \quad (4.54)$$

(4.53) được giải bằng phương pháp đường đặc trưng nêu trong mục 4.3.1 còn (4.54) giải bằng sơ đồ số nêu trong mục 4.4.4 , với θ = 2/3 , Δx = 1/41 và Δt = 1,5/41. Bảng 5 cho so sánh kết quả giữa nghiệm chính xác F và nghiệm tính toán F_T tại bước thời gian thứ 52 đối với ví dụ nêu trên.

Bảng 4.2: Kết quả số giữa nghiệm chính xác và nghiệm phân rã

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
F	2.214	2.668	2.935	2.995	2.845	2.495	1.970	1.307	0.551	-0.243
F_T	2.214	2.630	2.943	3.000	2.851	2.499	1.969	1.302	0.543	-0.253
i	**10**	**11**	**12**	**13**	**14**	**15**	**16**	**17**	**18**	**19**
F	-1.020	-1.726	-2.320	-2.732	-2.962	-2.983	-2.796	-2.411	-1.858	-1.17
F_T	-1.036	-1.744	-2.33	-2.753	-2.963	-3.000	-2.814	-2.427	-1.870	-118

Từ bảng 4.2 ta thấy kết quả tính toán bằng phương pháp phân rã, trong đó phương trình tải được giải bằng phương pháp đặc trưng, cho kết quả khá chính xác. Vì thế ta sẽ sử dụng phương pháp này cho tính toán trên thực tiễn và được dùng trong chương trình SAL.

4.5. Về tính dự báo của sơ đồ khi sử dụng phương pháp phân rã

4.5.1. Cách cho điều kiện biên cho bài toán mặn trên sông đơn

Gọi L là chiều dài sông và biên hạ lưu đặt tại x = 0, biên thượng lưu đặt tại x = L.

Tại biên hạ lưu x = 0:

a. Khi triều vào (Q > 0): Cho giá trị $S_1(t)$ tại x = 0, dùng giá trị này để giải phương trình tải (4.37) sẽ được các giá trị S_1, S_2, ..., S_N trên toàn nhánh sông. Dùng các giá trị này làm điều kiện

đầu cho (4.38). Các giá trị S_1 và S_N là giá trị biên cho (4.38). Như vậy sau khi giải (4.38) sẽ được nghiệm của bài toán. Trong trường hợp này chỉ cần cho giá trị tại hạ lưu.

b. Khi triều ra ($Q \leq 0$): Nếu biên thượng lưu x = L đủ xa biển tại đó độ mặn $S_N = 0$, thì dùng điều kiện này làm biên kết hợp với điều kiện ban đầu có thể tính được độ mặn trên toàn nhánh sông kể cả giá trị S_1 tại biên hạ lưu x = 0, nếu tại biên thượng lưu vẫn bị mặn thì phải cho trước độ mặn tại đây.

Tóm lại, nếu dòng chảy từ phía ngoài miền tính toán hướng vào biên thì tại đó phải cho độ mặn. Còn khi dòng chảy hướng từ miền tính toán ra biên thì độ mặn tại đó được tính. Như vậy nếu quá trình tính bắt đầu từ thời điểm triều đang ra, biết trước các điều kiện ban đầu và nếu biên thượng lưu đủ xa biển thì có thể tính được giá trị S_{min} tại biên hạ lưu khi triều ra. Khi triều vào tại biên hạ lưu chỉ cần biết giá trị S_{max} và chu kỳ triều thì bằng một phép nội suy nào đó giữa S_{min} và S_{max} là có thể xấp xỉ được đường quá trình mặn khi triều vào. Với cách tổ chức này chỉ cần biết trước các thông tin S_{max} và các thời điểm đạt max tại biên là có thể tính toán được. Với ưu điểm này mô hình tăng được tính dự báo.

4.5.2. Về ảnh hưởng của quá trình tải và quá trình khuếch tán

Nghiên cứu chặt chẽ về lý thuyết vai trò riêng rẽ của quá trình tải và khuếch tán (hay dispertion) trong quá trình xâm nhập mặn là vấn đề rất khó khăn, tuy nhiên bằng một ví dụ số cho bài toán xâm nhập mặn trên hệ thống sông Sài Gòn đưa ra trong bảng 4.3 ta rút ra một số nhận xét sau đây:

- ✧ Trong quá trình lan truyền mặn, dưới ảnh hưởng của thủy triều, quá trình tải giữ vai trò chủ yếu đối với một bước thời gian.
- ✧ Quá trình tán xạ (hay giả khuếch tán) chỉ có ảnh hưởng tích lũy sau một quá trình lâu dài, còn trong một bước Δt quá trình này hầu như không ảnh hưởng tới sự thay đổi nồng độ tại một điểm, vì thế có thể tính nồng độ tại hợp lưu thông qua quá trình tải, và như vậy quá trình tán xạ được tính thông qua lớp thời gian trước.
- ✧ Có thể tính xâm nhập mặn chỉ dùng một hệ số tán xạ và xem nó là hằng số cho toàn nhánh sông (hoặc một đoạn sông).

Bảng 4.3: So sánh giá trị nồng độ theo quá trình tải thuần túy (ST) và độ mặn toàn phần (S) ở các mặt cắt trên nhánh sông Sài Gòn ở giờ thứ 42 từ lúc bắt đầu tính toán

Mặt cắt	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
ST	14.50	10.75	9.88	9.33	7.48	6.35	5.88	4.56	3.50	2.31	1.25	0.69
S	14.50	10.75	9.89	9.34	7.47	6.35	5.89	4.57	3.49	2.31	1.26	0.69

Từ bảng 4.3 rõ ràng sự sai khác giữa S và ST là khôn đáng kể.

4.5.3. Cách cho điều kiện đầu trong bài toán lan truyền mặn

Từ việc giải phương trình tải bằng phương pháp đặ trưng ta thấy các giá trị tính toán phụ thuộc vào trường vận t dòng chảy và giá trị nồng độ tại lớp thời gian trước (hay điề

kiện đầu). Giá trị biên lan truyền theo hướng dòng chảy với vận tốc u. Nếu dòng chảy chỉ theo một hướng nhất định thì sau một khoảng thời gian nào đó toàn miền sẽ chịu ảnh hưởng của biên và không chịu ảnh hưởng của điều kiện ban đầu. Tuy nhiên do các dao động tuần hoàn của thủy triều làm dòng chảy luôn đổi hướng, do đó ảnh hưởng của điều kiện ban đầu trong bài toán mặn tồn tại rất lâu tùy thuộc vào tốc độ truyền triều, biên độ triều, địa hình, lưu lượng nước ngọt từ thượng nguồn, ... Các điểm cách xa nguồn mặn ảnh hưởng của điều kiện ban đầu càng lâu. Vì thế để có thể đạt được một điều kiện ban đầu gần đúng, trong thực hành thường cho theo hai cách sau đây:

- ✧ Dùng điều kiện biên tuần hoàn (cả thủy lực và mặn) lặp lại một số lần, với trạng thái mặn ban đầu là không. Khi đã đạt được một giá trị nào đó cho toàn hệ thống mà giá trị này thay đổi không nhiều giữa hai lần lặp thì chọn làm điều kiện ban đầu cho bài toán mặn. Cách cho điều kiện ban đầu này đòi hỏi một số bước thời gian tính toán, thường được kết hợp trong quá trình điều chỉnh mô hình thủy lực.
- ✧ Căn cứ vào số liệu thực đo tại một số trạm, cho trước một phân bố nào đó dựa trên nội suy tuyến tính, sau đó dùng điều kiện tuần hoàn như cách nói trên. Thực tiễn tính toán cho thấy thường sau 25 đến 50 chu kỳ triều (chẳng hạn đối với Đồng bằng sông Cửu long) mới có thể đạt được điều kiện ổn định tùy thuộc vào sự phức tạp của từng hệ sông.

Vấn đề cho điều kiện ban đầu liên quan chặt chẽ với các bài toán dự báo và tính phương án.

4.6. Điều kiện tương hợp tại hợp lưu trong bài toán mặn trên hệ sông

Đối với hệ sông, nếu biết trước được độ mặn tại hợp lưu thì bài toán đưa về giải cho từng nhánh sông riêng rẽ như nêu trong 4.5.1. Trong trường hợp này hợp lưu đóng vai trò như một biên. Như đã lý giải trong 4.5.1 khi dòng chảy của các nhánh hướng về hợp lưu thì độ mặn tại các mặt cắt áp sát hợp lưu có thể tính được bằng cách giải phương trình tải. Khi dòng chảy từ hợp lưu đi ra thì độ mặn tại các mặt cắt áp sát hợp lưu phải được cho. Khi dòng chảy hướng tới hợp lưu thì nồng độ tại các mặt cắt áp sát hợp lưu nói chung là khác nhau, chỉ sau khi xáo trộn mới có thể có một nồng độ chung (tất nhiên đây cũng là một giả thiết nhưng sát thực tế hơn). Vì thế ở đây ta giả thiết như sau:

- Tại hợp lưu: Tổng lượng mặn mang tới bằng tổng lượng mặn mang ra khỏi hợp lưu (quy luật bảo toàn).
- Sau khi xáo trộn nồng độ mặn tại các mặt cắt áp sát hợp lưu của dòng chảy ra khỏi hợp lưu sẽ như nhau. (Đây là một giả thiết xấp xỉ), còn tại các mặt chảy vào nồng độ không nhất thiết bằng nhau.

Dựa trên hai giả thiết này nồng độ mặn tại các mặt cắt chảy ra áp sát hợp lưu được tính như sau:

$$SN = \frac{\sum_i Q_i^v S_i}{\sum_j Q_j^R} \qquad (4.55)$$

Với SN là nồng độ mặn tại các mặt cắt chảy ra khỏi hợp lưu; S_i , Q_i^v là độ mặn và lưu lượng tại các mặt cắt áp sát hợp lưu của các nhánh chảy vào. Q_j^R là lưu lượng tại các mặt cắt chảy ra . Nồng độ S_i là nghiệm của (4.37). Chú ý rằng:

$$\sum_i Q_i^v = \sum_j Q_j^R$$

Trong (4.55) không dùng khái niệm thể tích nút, không dùng việc sai phân phương trình cân bằng tại nút, tránh giả thiết xáo trộn đều của các nhánh vào và không trực tiếp dùng khái niệm nồng độ tại nút. Mặt khác, để tính S_i ta dùng thuật toán đặc trưng, như đã chỉ trong thực nghiệm số nêu ở các mục trên, đạt được độ chính xác cần thiết. Cũng lưu ý rằng tại các mặt cắt áp sát hợp lưu, quá trình dispertion được tính qua lớp thời gian trước.

4.7. Phương pháp tuyến tính hóa trong bài toán mặn

Để giải (4.2) còn có thể dùng một phương pháp giải gần đúng sau đây: Khi giải (4.2) tại lớp thời gian thứ n +1 ta lấy giá trị của vế phải tại lớp thời gian thứ n. Như vậy (4.2) trở thành phương trình hyperbol dạng:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u(x,t)\frac{\partial f}{\partial x} = g(x,t)$$

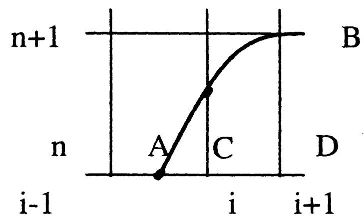
Trong đó hàm g(x,t) được xem là đã biết. Hệ này có phương trình đặc trưng dx = u.dt với hệ thức đặc trưng:

$$df = g.dt \qquad (4.56)$$

Hệ (4.56) có thể tích phân dọc theo đặc trưng AB (Hình 4) như sau:

$$\int_A^B df = \int_A^B g\,dt$$

Hoặc $f_B = f_A + g_{tb}\,.\Delta t$



Hình 14:

Giá trị trung bình g_{tb} có thể lấy theo các công thức khác nhau, chẳng hạn:

$$g_{tb} = 0{,}5(\,g_A + g_D\,)$$

Các giá trị g_A, f_A được tính qua các giá trị đã biết f_{i-1} và f_i bằng một phép nội suy nào đó như đã nêu trong cách giải phương trình tải. Chú ý rằng g là đạo hàm bậc hai, tại hai đầu biên chưa biết trước (mặc dù biết f_1 và f_N) vì thế phải giả thiết g_1 = g_N = 0, tức là không có khuếch tán tại hai đầu. Quá trình tính toán lại trở về gần đúng với quá trình phân rã. Để xác định các đạo hàm g_2 , ... , g_{N-1} cũng phải giải hệ phương trình ba đường chéo. Ta không trình bày chi tiết phương pháp này ở đây.

4.8. Tính mặn khi có công trình

Trong chương 3 ta đã trình bày cách tính thủy lực hệ thống sông khi có công trình. Ta đã coi công trình như một nhánh đặc biệt (không có chiều dài) nối hai nút thượng và hạ lưu, tại đó có một nhánh chảy vào và một nhánh chảy ra. Nhánh chảy vào tương ứng với thượng lưu, còn nhánh chảy ra tương ứng với hạ lưu. Qua công trình lượng mặn vẫn bảo toàn hoặc ở dạng biểu thức toán học:

$$Q.S_u = q.S_d \qquad (4.57)$$

Trong đó S_u là độ mặn ở thượng lưu, S_d là độ mặn tại hạ lưu. Khi qua công trình thì Q = q, do đó $S_u = S_d$.

Từ cách tính mặn tại hợp lưu ta có:

✧ Nếu dòng chảy từ thượng lưu tới hạ lưu:

$$S_d = S_u$$

✧ Nếu dòng chảy từ hạ lưu tới thượng lưu:

$$S_u = S_d$$

Sau khi có giá trị nồng độ tại thượng lưu (hoặc hạ lưu), bài toán trở về tính cho mỗi nhánh riêng rẽ.

Như vậy khi xem công trình là một nhánh đặc biệt như trong cách tính thủy lực (nêu trong chương 3) cách tính mặn khi có công trình đều dễ dàng về khía cạnh mô phỏng trên máy nhờ cách tính mặn bằng phương pháp phân rã (cách mô tả, tổ chức chương trình, vào ra số liệu,..).