

Kapitel 5 MATEMATISK OG NUMERISK GRUNDLAG FOR GRUNDEVANDSMODELLERING

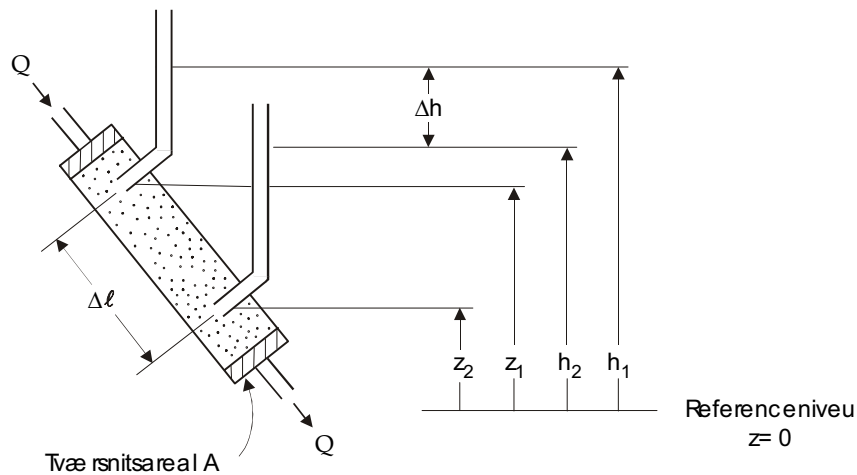
Karsten Høgh Jensen
 Geologisk Institut, Københavns Universitet

Nøglebegreber: Darcy's lov, kontinuitetsligning, styrende differentiaalligning, numerisk diskretiseringsmetoder, løsning af ligningssystemer

ABSTRACT: Den styrende differentiaalligning for grundvandsstrømninger udledes ved at kombinere strømningens ligning (Darcy's lov) med massebevarelsesligningen. En numerisk approksimation til denne ligning involverer en diskretisering både i steds- og tidsdomænet. I de fleste grundvandsmodeller anvendes "finite difference" metoden. Der gives en introduktion til de generelle principper bag denne metode. For eksplicitte formuleringer fås en meget simpel løsning, men til gengæld er der restriktioner på tidsskridtet. Implicitte formuleringer fører til et mere kompliceret system af koblede lineære ligninger, som skal løses ved hjælp af matrixløserne. Til gengæld er der ikke de samme begrænsninger på tidsskridtet.

5.1 TRE-DIMENSIONALE STRØMNINGSLIGNING

Det matematiske grundlag for kvantitative beskrivelser af strømninger i porøse medier og herunder grundvandsstrømninger er Darcy's lov, som blev fremsat af den franske ingeniør Darcy i 1856. Udgangspunktet for udviklingen af denne lovmæssighed var en række meget simple forsøg udført i en cylinder af tværsnitsareal A fyldt med sand. For forskellige vandføringer Q (m^3/s) gennem cylinderen målt det hydrauliske trykniveau (potentialet) ved hjælp af to manometre placeret i højden z_1 og z_2 (m) over et referenceniveau $z=0$. Afstanden mellem manometrene langs rørets længdeakse er Δl (m) og højden af vandstanden i de to manometerrør er henholdsvis h_1 og h_2 (m), jvnf. figur 5.1.



Figur 5.1 Eksperimentel opstilling til illustration af Darcy's lov

Filterhastigheden eller Darcy hastigheden q (m/s) defineres som vandføringen divideret med det gennemstrømmede tværsnitsareal A (m²):

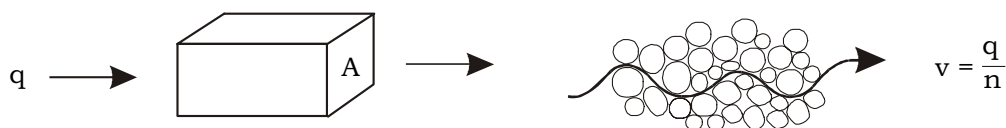
$$q = \frac{Q}{A} \quad (5.1)$$

Denne volumenflux er en fiktiv hastighed, som repræsenterer vandstrømningen over hele tværsnittet inklusive kornene. Filterhastigheden repræsenterer en makroskopisk størrelse af relevans for vandstrømninger, og den er let at måle. Imidlertid må den ikke forveksles med den mikroskopiske porevandshastighed v mellem de enkelte korn, som er af relevans for transport af opløste stoffer, men som til gengæld ikke kan måles direkte.

Porevandshastigheden v (m/s) udregnes om:

$$v = \frac{q}{n} \quad (5.2)$$

hvor n er porøsiteten. Forskellen mellem de to hastighedsbegreber er illustreret i figur 5.2.



Figur 5.2 Illustration af Darcy hastighed og porevandshastighed

Darcy's forsøg (figur 5.1) viste, at filterhastigheden q er proportional med forskellen i hydraulisk trykniveau h_1-h_2 og omvendt proportional med afstanden mellem manometerudtagene Δl målt langs røret. Indføres $\Delta h=h_2-h_1$ fås at $q \sim -\Delta h$ og $q \sim -1/\Delta l$. Indføres en proportionalitetskonstant K kan Darcy's lov skrives som:

$$q = -K \frac{\Delta h}{\Delta l} \quad (5.3)$$

hvor $\Delta h/\Delta l$ er gradienten i hydraulisk trykniveau og konstanten K den hydrauliske ledningsevne (m/s). Formuleret på differentiell form ser ligningen således ud:

$$q = -K \frac{dh}{dl} \quad (5.4)$$

Denne lovmæssighed angiver altså, at der er en lineær sammenhæng mellem vandfluxen og gradienten i det hydrauliske trykniveau med en proportionalitetskonstant K , som er en parameter, der afhænger både af det porøse mediums materialeegenskaber og den strømmende væskes egenskaber. En parameter, som kun karakteriserer det porøse medium er permeabiliteten k (m²), og mellem disse to parametre er der følgende sammenhæng:

$$K = \frac{k \rho g}{\mu} \quad (5.5)$$

hvor ρ er vandets densitet (kg/m³), μ er viskositeten (kg/ms) og g er tyngdeaccelerationen (m/s²). De to parametre anvendes i flæng, og ofte anvendes betegnelsen permeabilitet, hvor der i virkeligheden menes hydraulisk ledningsevne.

Darcy's ligning forudsætter at der forekommer laminar strømning, hvilket sædvanligvis er tilfældet i praksis. Opskrevet for rene grundvandsstrømninger som anført i ligning (5.4) er der tale om en meget simpel lineær ligning, som sædvanligvis ikke giver anledning til de store løsningsmæssige problemer. Løsningen af Darcy's ligning er i overvejende grad kompliceret af den meget store naturlige variation, der forekommer dels indenfor de samme sedimenttyper og selvfølgelig ikke mindst imellem de forskellige aflejringer. Den rumlige variation i den hydrauliske ledningsevne er særdeles vanskelig at kortlægge og kvantificere.

Darcy's ligning kan generaliseres til både to og tre dimensioner, og i stedet for at beskrive strømning i forhold til en koordinat langs strømningsretningen, er det mere hensigtsmæssigt at relatere beskrivelsen til et indlagt koordinatsystem. Antages x og y akserne placeret i horisontalplanet og z akse vinkelret herpå, kan den tre-dimensionale version af Darcy's lov i den mest simple form opskrives som:

$$\begin{aligned} q_x &= -K_x \frac{\partial h}{\partial x} \\ q_y &= -K_y \frac{\partial h}{\partial y} \\ q_z &= -K_z \frac{\partial h}{\partial z} \end{aligned} \quad (5.6)$$

hvor K_x , K_y og K_z repræsenterer de hydrauliske ledningsevner i x , y og z retningerne. Da h nu er en funktion af x , y og z er de stedslige afledede nu anført som partiel differentiation. Som opskrevet ovenfor kræves, at koordinataksene er orienteret langs de principale retninger for den geologiske anisotropi. Selv om det måske ikke altid er tilfældet i praksis, vil en mere komplet form af ligning (5.6) involvere flere komponenter af den hydrauliske ledningsevne, som det vil være vanskeligt (umuligt) at kvantificere i praksis. Tre-dimensionale beregninger forenkles ofte yderligere under antagelse af, at der er tale om den samme parameterværdi i horisontalplanet, dvs. $K_x=K_y$, hvilket betyder, at der "kun" skal parameterfastsættes en værdi for henholdsvis de horisontale og vertikale strømninger.

For at løse et strømningsproblem skal strømningsligningen (dvs. Darcy's lov) kombineres med massebevarelsesligningen eller kontinuitetsligningen. I den forbindelse er det specifikke magasintal S_s for grundvandsmagasinet en relevant parameter. Det specifikke magasintal defineres som den vandmængde 1 m^3 af grundvandsmagasinet kan frigive ved en sænkning i det hydrauliske trykniveau på 1 m . Denne vandfrigivelse skyldes dels en elastisk sammentrykning af kornskelettet og dels en udvidelse af vandet. Det specifikke magasintal S_s (m^{-1}) kan udregnes som:

$$S_s = \rho g(\alpha + n\beta) \quad (5.7)$$

hvor α og β repræsenterer henholdsvis kornskelettets og vandets kompressibilitet, hvor førstnævnte mekanisme sædvanligvis er klart den dominerende.

Herefter kan massebevarelsesligningen opstilles. Denne ligning udtrykker, at netto tilstrømningen til et enhedsvolumen i grundvandsmagasinet skal modsvares af en tilsvarende opmagasinering. Antages at både de stedslige og tidslige ændringer i vandets densitet er negligable kan bevarelsesligningen eller med disse antagelser kontinuitetsligningen udtrykkes som:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y} - \frac{\partial q_z}{\partial z} - Q_p + R \quad (5.8)$$

hvor Q_p angiver fjernet vand (f.eks. ved oppumpning) og R angiver tilført vand (f.eks. som nedsvivning). Kombineres strømningsligningen (5.6) og kontinuitetsligningen (5.8) fås den styrende partielle differentilligning for 3-D grundvandsstrømninger:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) - Q_p + R \quad (5.9)$$

Denne ligning er det matematiske grundlag for beskrivelse af tre-dimensionale grundvandsstrømninger.

5.2 TO-DIMENSIONAL STRØMNINGSLIGNING

For regionale grundvandsstrømninger er de vertikale strømningshastigheder ofte meget mindre end de horisontale ($q_z \ll q_x, q_y$), hvilket betyder, at der approksimativt kan antages hydrostatisk trykfordeling over grundvandsmagasinets dybde. For artesiske grundvandsmagasiner med tidsinvariant lagtykkelse kan den tredje dimension elimineres ved at foretage en integration over dybden, således at den samlede horisontale strømning og lagtykkelsens samlede magasineringkapacitet beregnes.

To nye parametre defineres, transmissiviteten T (m^2/s)

$$T = \int_0^d K(z) dz \quad (5.10)$$

hvor d er dybden af grundvandsmagasinet, og magasintallet S (-)

$$S = \int_0^d S_s dz \quad (5.11)$$

Hvis der er tale om homogene magasiner udregnes de to parametre simpelt som

$$T = Kd \quad (5.12)$$

og

$$S = S_s d \quad (5.13)$$

Den vertikalt integrerede version af strømningssligning (5.9) for to-dimensionale strømninger i artesiske grundvandsmagasiner har følgende udseende:

$$S \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(T_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) - Q_p + R \quad (5.14)$$

hvor T_x og T_y repræsenterer transmissiviteterne i henholdsvis x - og y -aksens retning.

For frie grundvandsmagasiner, hvor den øvre afgrænsning udgøres af grundvandsspejlet (defineret som det niveau, hvor vandtrykket svarer til atmosfæretrykket), kan der under antagelse af, at der er hydrostatisk trykfordeling i et vertikalsnit, ligeledes udledes en styrende differentialligning for horisontale strømninger:

$$S_y \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x h \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y h \frac{\partial h}{\partial y} \right) - Q_p + R \quad (5.15)$$

Denne ligning betegnes Boussinesq' ligning og er her opskrevet under antagelse af, at referenceniveauet udgøres af magasinets nedre begrænsning, således at magasinets samlede ledningsevne er Kh . Dette svarer til en tidsvarierende transmissivitet, som betyder, at der er tale om en ikke-lineær ligning. Parameteren S_y betegnes specifik ydelse, og den repræsenterer den vandmængde, som

frigives, når grundvandsspejlet sænkes 1 m. Vandfrigivelsen fra et frit magasin er meget større end fra et artesisk magasin, fordi der i førstnævnte tilfælde er tale om en afdræning af porevoluminet, mens frigørelsen i artesisk magasin som tidligere beskrevet skyldes kornskelettets og vandets sammentrykkelighed. I tilfælde af, at fluktuationerne i grundvandsspejlet er små i forhold til magasinets vertikale udstrækning, kan K_h tilnærmelsesvist regnes som en konstant størrelse, Boussinesq' ligning er dermed enslydende med strømningssligningen for artesiske grundvandsmagasiner. Ligning (5.14) er inkluderet i alle to-dimensionale numeriske grundvandsmodeller, og i de fleste modeller er det desuden muligt at foretage beregninger på grundlag af ligning (5.15). For ikke-stationære beregninger er det nødvendigt at angive en værdi for magasintallet, hvorimod stationære løsninger i de fleste modeller opnås ved at sætte magasintallet til 0.

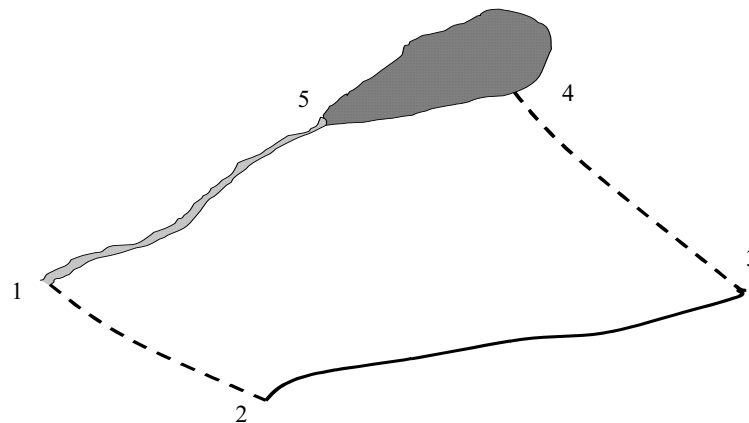
5.3 FORUDSÆTNINGER FOR LØSNING AF PARTIELLE DIFFERENTIALLIGNINGER

For at forenkle diskussionen af de generelle principper for diskretisering og løsning af de partielle differentialligninger for grundvandsstrømninger vil den følgende beskrivelse tage udgangspunkt i de to-dimensionale strømningssligninger. Principperne kan imidlertid generaliseres til tre dimensioner.

For at løse strømningssligningen enten analytisk eller numerisk skal følges specificeres:

1. Initialbetingelser for modelområdet (hydraulisk trykniveau). Initialbetingelser er kun relevante for ikke-stationære strømningsproblemer.
2. Fjernelse eller tilførsel af vand indeni modelområdet (oppumpning, nedsivning)
3. Randbetingelser langs hele modelranden. Der er tre mulige randbetingelser:
 - (i) type 1 (Dirichlet betingelse): specificeret hydraulisk trykniveau
 - (ii) type 2 (Neumann betingelse): specificeret flux. Som et meget anvendt specialtilfælde for denne type randbetingelse kan nævnes en 0-flux randbetingelse, som kan anvendes i forbindelse med en impermeabel barriere, et grundvandsskel eller en strømlinie
 - (iii) type 3 (Cauchy betingelse): trykniveauafhængig flux randbetingelse. Denne randbetingelse optræder, når der sker vandudveksling gennem semipermeable lag, f.eks. bundsedimenter i vandløb eller lagfølger (aquitard) til tilgrænsende grundvandsmagasiner. Vandfluxen vil være proportional med forskellen mellem trykniveauet i det betragtede grundvandsmagasin og trykniveauet i enten vandløbet eller det tilgrænsende magasin.

I figur 5.3 er vist et eksempel på anvendelse af de forskellige typer af randbetingelser:



Figur 5.3 Illustration af forskellige typer randbetingelser for en planmodel af et grundvandsmagasin

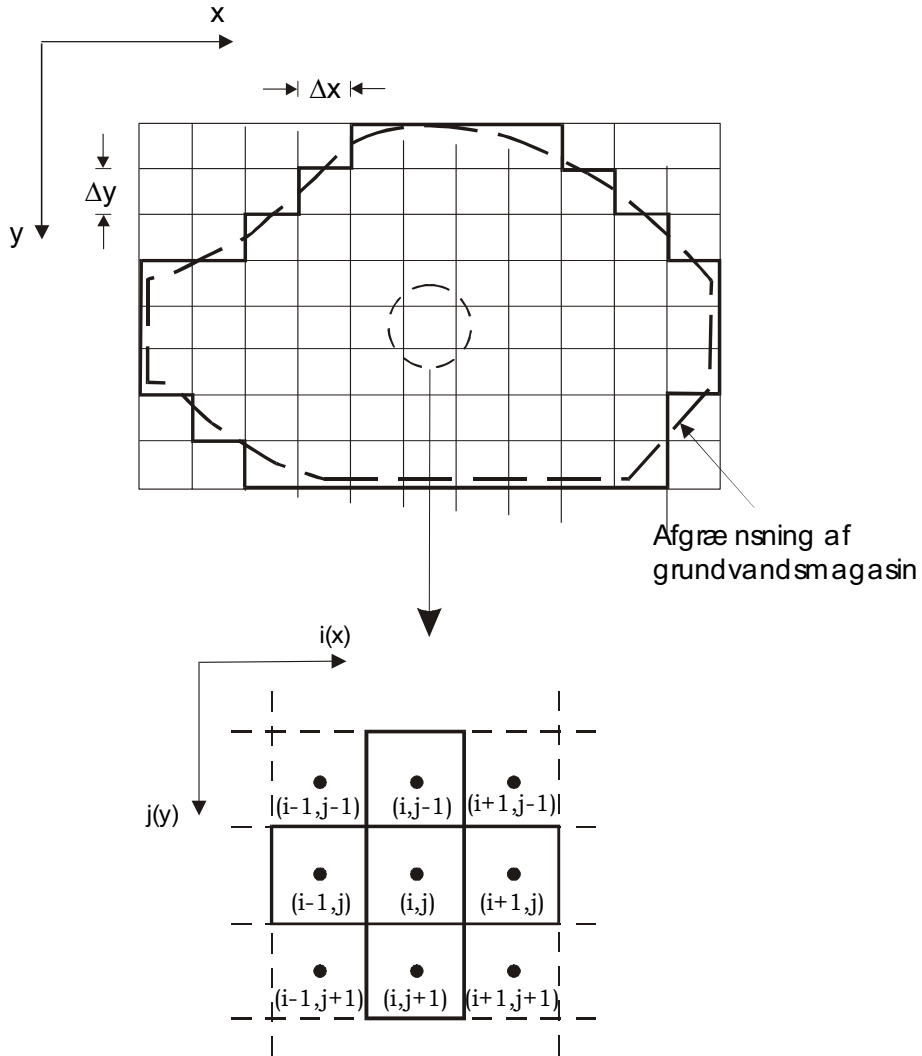
- 1-2: strømlinie (type 2: 0-flux)
- 2-3: grundvandsskel (type 2: 0-flux)
- 3-4: strømlinie (type 2: 0-flux)
- 4-5: sø (type 1: specificeret trykniveau)
- 5-1: vandløb (type 3)

5.4 NUMERISK DISKRETISERING

De klassiske metoder til diskretisering af differentialligninger er "finite difference" og "finite element" metoderne, hvor førstnævnte er den mest udbredte indenfor grundvandsmodellering. Begge metoder indebærer, at den partielle differentialligning erstattes af et sæt af differensligninger baseret på en diskretisering i sted og tid. Metoderne rummer hver deres fordele og ulemper. "Finite element" metoden har bl.a. den fordel, at der kan foretages en meget fleksibel stedlig diskretisering. I de mindre interessante dele af modelområdet kan der anvendes en grov diskretisering, som så gradvist kan forfines i de områder, hvor der forekommer større gradienter i det hydrauliske trykniveau, f.eks. nær indvindingsboringer eller vandløb. Til gengæld er metoden konceptuelt mere kompliceret og kræver en større programmeringsmæssig indsats. Desuden kan definitionen og opstillingen af det numeriske net være mere besværligt. "Finite difference" metoden er konceptuelt noget enklere, og det er derfor den metode, som vil danne grundlag for den efterfølgende introduktion til numeriske metoder.

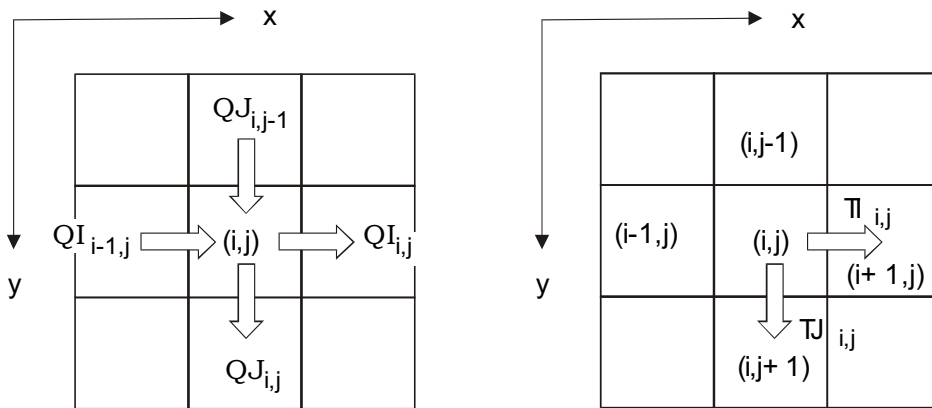
Enhver anvendelse af en numerisk grundvandsmodel indebærer, at der skal foretages en diskretisering af grundvandsmagasinet ved at foretage en opdeling i et antal beregningslementer som illustreret i figur 5.4. I x-aksens retning benyttes index i og i y-retningen index j , således at et bestemt element er karakteriseret ved koordinaten (i,j) . Antallet af elementer i de to retninger betegnes ved NX og NY . Det er indlysende, at for en finere diskretisering Δx og Δy opnås en mere nøjagtig og detaljeret beskrivelse af strømningsforholdene. Som det også fremgår af figuren, vil en finere diskretisering give en bedre opløsning af afgrænsningen af magasinet. Tilsvarende diskretiseringen i stedet foretages også en opdeling af tidsdomænet i et antal trin t_0, t_1, t_2, \dots . Tidsskridtet Δt kan varieres afhængig af hvor hurtigt trykændringer forplanter sig.

For at udvikle den diskretiserede form af den styrende differentialligning foretages sædvanligvis en Taylor udvikling, hvorved differensligningen og de tilhørende trunkeringsled fremkommer. I det følgende anvendes en mere simpel og gennemskuelig metode, som består i at opstille de diskretiserede versioner af Darcy's lov og kontinuitetsligningen for hver enkelt celle, Kinzelbach (1986).



Figur 5.4. Diskretisering af et grundvandsmagasin med kvadratiske elementer

Vi betragter en udvalgt celle (i,j) og dens fire naboceller, og det antages er der kun sker strømning mellem centercellen og de fire naboceller, figur 5.5. Figuren angiver den fortegnsg- og notationskonventionen, som anvendes for strømmingen og transmissiviteten mellem nabo celler.



Figur 5.5 Fortegnsg- og notationskonvention for vandsfluxe og transmissiviteter.

QI og QJ repræsenterer vandfluxen mellem to beregningspunkter i henholdsvis x- og y-aksens retninger, og TI og TJ angiver på tilsvarende måde gennemsnitlige eller repræsentative transmissivitetsværdier mellem beregningspunkterne.

Først opstilles vandbalancen for centercellen (i,j) for tidsintervallet Δt , idet det antages, at Δt er så kort, at strømningerne mellem cellerne kan udtrykkes ved et repræsentativt trykniveau for dette tidsinterval. Idet der er tale om fire horisontale strømningsbidrag samt bidrag for oppumpning (Q) og nedsivning (R), kan der opstilles følgende vandbalance:

$$(h_{i,j}(t + \Delta t) - h_{i,j}(t))S_{i,j}\Delta x\Delta y = (QI_{i-1,j} + QJ_{i,j-1} - QI_{i,j} - QJ_{i,j} - Q + R)\Delta t \quad (5.16)$$

De fire horisontale vandfluxe kan formuleres på diskret form som:

$$\begin{aligned} QI_{i-1,j} &= \Delta y TI_{i-1,j} \frac{h_{i-1,j}(t') - h_{i,j}(t')}{\Delta x} \\ QJ_{i,j-1} &= \Delta x TJ_{i,j-1} \frac{h_{i,j-1}(t') - h_{i,j}(t')}{\Delta y} \\ QI_{i,j} &= \Delta y TI_{i,j} \frac{h_{i,j}(t') - h_{i+1,j}(t')}{\Delta x} \\ QJ_{i,j} &= \Delta x TJ_{i,j} \frac{h_{i,j}(t') - h_{i,j+1}(t')}{\Delta y} \end{aligned} \quad (5.17)$$

Det er her antaget, at den vandstrømning, der sker indenfor tidsskridtet Δt kan beskrives ved en værdi for det hydrauliske trykniveau til et tidspunkt t' i intervallet $\{t; t+\Delta t\}$.

Når transmissiviteten varierer fra celle til celle melder spørgsmålet sig, hvorledes de repræsentative værdier TI og TJ for strømningen mellem cellerne udregnes ud fra værdierne for cellerne. Sædvanligvis anvendes enten et aritmetrisk gennemsnit

$$TI_{i,j} = \frac{T_{i,j} + T_{i+1,j}}{2} \quad (5.18)$$

eller et harmonisk gennemsnit

$$TI_{i,j} = \frac{2T_{i,j}T_{i+1,j}}{T_{i,j} + T_{i+1,j}} \quad (5.19)$$

Det harmoniske gennemsnit svarer til en seriemodstand, hvilket er i overensstemmelse med, at vandet først skal strømme gennem et område med en transmissivitetsværdi og dernæst et område med en anden værdi. Teoretisk er denne gennemsnitsdannelse derfor at foretrække, og yderligere rummer den fordele, når der skal inkorporeres 0-flux randbetingelser.

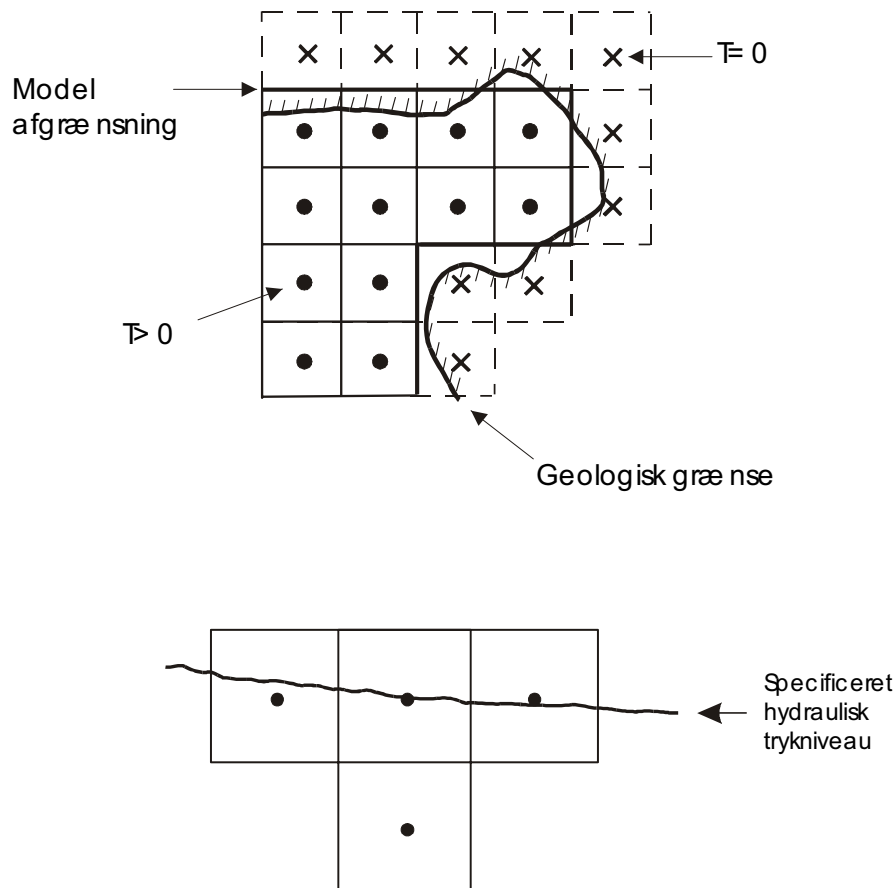
Kombineres strømning ligningerne for de fire vandudvekslinger med nabocellerne ligning (5.17) med kontinuitetsligningen ligning (5.16) fås følgende ligning:

$$\begin{aligned} S_{i,j} \frac{(h_{i,j}(t + \Delta t) - h_{i,j}(t))}{\Delta t} &= TI_{i-1,j} \frac{h_{i-1,j}(t') - h_{i,j}(t')}{\Delta x^2} + TJ_{i,j-1} \frac{h_{i,j-1}(t') - h_{i,j}(t')}{\Delta y^2} \\ &\quad - TI_{i,j} \frac{h_{i,j}(t') - h_{i+1,j}(t')}{\Delta x^2} - TJ_{i,j} \frac{h_{i,j}(t') - h_{i,j+1}(t')}{\Delta y^2} - Q + R \end{aligned} \quad (5.20)$$

En sådan differensligning kan opskrives for alle celler i modelområdet, hvilket fører til i alt $NX*NY$ ligninger. I disse ligninger skal der indbygges information om modelområdet og randbetingelserne. For de celler, som ligger uden for modelområdet og derfor ikke skal medtages i beregningerne, sættes transmissiviteten til $T=0$. 0-flux randbetingelsen, som optræder hyppigt i grundvandsmodellering (impermeable grænser, grundvandsskel og strømmlinier), indbygges meget enkelt, når der anvendes et harmonisk gennemsnit af transmissiviteten mellem beregningspunkterne, ligning (5.19). Når transmissiviteten ved en impermeabel grænse angives til 0, vil denne gennemsnitsdannelse føre til, at der ikke vil strømme vand på tværs af grænsen, jvnf. figur 5.6. Flux betingelser med værdier forskellig fra 0 indbygges i modellen via Q og R leddene i ligning (5.20). Ved specificerede hydrauliske trykniveauer udelades differensligningen for denne celle af beregningerne og erstattes med de angivne værdier

$$h_{i,j} = f(t) \tag{5.21}$$

jvnf. figur 5.6.



Figur 5.6 Indbygning af randbetingelser i den numeriske formulering

5.5 FORMULERING OG LØSNING AF DIFFERENSLIGNINGER

Når randbetingelserne er indbygget i ligningerne er næste trin at løse det sammenhørende sæt af $NX*NY$ differensligninger. Før dette kan ske skal værdien for t' i ligning (5.20) imidlertid specificeres, og valget af denne værdi har afgørende indflydelse på løsningsmetoden. Diskussionen af de

forskellige metoder kan tage udgangspunkt i følgende ligning, hvor den værdi for $h(t')$, som indgår i ligning (5.17) til beregning af Darcy fluxen, udregnes som et vægtet gennemsnit af $h(t)$ og $h(t+\Delta t)$:

$$h_{i,j}(t') = (1 - \theta)h_{i,j}(t) + \theta h_{i,j}(t + \Delta t) \quad (5.22)$$

hvor θ kan antage værdier mellem 0 og 1. For $\theta=0$ kan trykniveauerne til det nye tidsskridt udtrykkes eksplicit som funktion af trykniveauerne for det gamle tidsskridt (heraf navnet eksplicitte metode), hvorimod $\theta=1$ resulterer i en formulering, hvor trykniveauerne til det nye tidsskridt indgår implicit i formuleringen (heraf navnet implicitte metode). For $\theta=0.5$ fås den såkaldte Crank-Nicholson formulering, som er et gennemsnit af de eksplicitte og implicitte formuleringer. I det følgende vil kun den eksplicitte og implicitte metode blive beskrevet.

Eksplicit metode

For $\theta=0$ fås den eksplicitte formulering svarende til at $t'=t$. Introduceres denne værdi i ligning (5.20) fås følgende differensligning:

$$\begin{aligned} h_{i,j}(t + \Delta t) = h_{i,j}(t) + \\ \frac{\Delta t}{S_{i,j}} (TI_{i-1,j} \frac{h_{i-1,j}(t) - h_{i,j}(t)}{\Delta x^2} + TJ_{i,j-1} \frac{h_{i,j-1}(t) - h_{i,j}(t)}{\Delta y^2} \\ - TI_{i,j} \frac{h_{i,j}(t) - h_{i+1,j}(t)}{\Delta x^2} - TJ_{i,j} \frac{h_{i,j}(t) - h_{i,j+1}(t)}{\Delta y^2} - Q + R) \end{aligned} \quad (5.23)$$

hvor $i=1, 2, 3 \dots NX$ og $j=1, 2, 3, \dots NY$. Som det fremgår af ligningen er trykniveauet til det næste diskrete tidspunkt udtrykt eksplicit som funktion af det kendte trykniveau for det foregående tidsskridt. Beregningsgangen foregår derfor simpelt ved, at ligningerne for alle beregningspunkter for hvert tidsskridt opdateres og trykniveauet til det nye tidspunkt udregnes, som herefter indgår som beregningsgrundlag for det næste tidsskridt. Herved kan simuleringen udføres fra starttidspunkt til et specificeret sluttidspunkt.

Den eksplicitte løsningsmetode er meget simpel at programmere, men den har imidlertid den ulempe, at der skal anvendes små Δt for at undgå, at løsningen bliver ustabil. For at sikre stabilitet skal følgende numeriske kriterium være opfyldt:

$$\frac{T}{S} \left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right) \leq \frac{1}{2} \quad (5.24)$$

for samtlige beregningspunkter. Det fører ofte til meget små værdier for Δt , som giver urealistiske beregningstider, hvis der er tale om store modelområder og simuleringer for mange år.

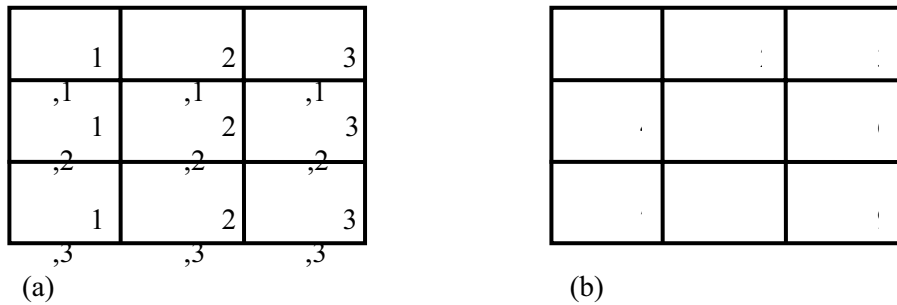
Implicit løsning

Hvis $\theta=1$ fås følgende formulering af differensligningen (5.20):

$$\begin{aligned}
 &h_{i-1,j}(t + \Delta t) \frac{TI_{i-1,j}}{\Delta x^2} + h_{i,j-1}(t + \Delta t) \frac{TJ_{i,j-1}}{\Delta y^2} + \\
 &h_{i,j}(t + \Delta t) \left(-\frac{TI_{i-1,j}}{\Delta x^2} - \frac{TI_{i,j}}{\Delta x^2} - \frac{TJ_{i,j-1}}{\Delta y^2} - \frac{TJ_{i,j}}{\Delta y^2} - \frac{S_{i,j}}{\Delta t} \right) + \\
 &h_{i+1,j}(t + \Delta t) \frac{TI_{i,j}}{\Delta x^2} + h_{i,j+1}(t + \Delta t) \frac{TJ_{i,j}}{\Delta y^2} = -Q + R - S_{i,j}h_{i,j}(t)\Delta t
 \end{aligned} \tag{5.25}$$

hvor $i=1, 2, 3 \dots NX$ og $j=1, 2, 3 \dots NY$. Som det fremgår af denne differensligning er trykniveauet $h_{i,j}(t+\Delta t)$ ikke længere udtrykt eksplicit som funktion af informationer fra det foregående tidskridt, men i ligningen optræder tillige de ukendte trykniveauer til det nye tidspunkt for nabocellerne, heraf navnet "implicit". Der er nu tale om et system af koblede lineære differensligninger.

Lad os som eksempel betragte et meget simpelt system bestående af 3x3 beregningspunkter, figur 5.7.



Figur 5.7 Grundvandsmodel på 3x3 numeriske celler.

For ovennævnte simple system er der tale om at beregne trykniveauet for 9 celler. I stedet for at referere til en celle ved koordinaterne (i,j) (figur 5.7a) indføres en mere simpel indeksering, hvor hver celle tildeles et nummer, som starter i øverste venstre hjørne og derefter gennemløber cellerne rækkevis i alt $N=NX*NY$ beregningsceller (figur 5.7b). Med denne notation kan ligning (5.25) opskrives på følgende måde

$$\sum_{l=1}^N a_{kl} h_l(t + \Delta t) = b_k \quad (k = 1, \dots, N) \tag{5.26}$$

hvor a_{kl} er en $N \times N$ matrix og b er en vektor med kendte størrelser. En mere kompakt måde at skrive dette ligningssystem på er

$$[A]\{h\} = \{b\} \tag{5.27}$$

Elementerne i denne matrix udregnes som

$$\begin{aligned}
 a_{kk} &= -\frac{TI_{i-1,j}}{\Delta x^2} - \frac{TJ_{i,j-1}}{\Delta y^2} - \frac{TI_{i,j}}{\Delta x^2} - \frac{TJ_{i,j}}{\Delta y^2} - \frac{S_{i,j}}{\Delta t} \\
 a_{k,k+1} &= \frac{TI_{i,j}}{\Delta x^2} & a_{k,k-1} &= \frac{TI_{i-1,j}}{\Delta x^2} \\
 a_{k,k-NX} &= \frac{TJ_{i,j-1}}{\Delta y^2} & a_{k,k+NX} &= \frac{TJ_{i,j+1}}{\Delta y^2}
 \end{aligned}
 \tag{5.28}$$

For en 3x3 model har matricen følgende udseende

$$\begin{pmatrix}
 x & x & 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 x & x & x & 0 & x & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & x & x & 0 & 0 & x & 0 & 0 & 0 \\
 x & 0 & 0 & x & x & 0 & x & 0 & 0 \\
 0 & x & 0 & x & x & x & 0 & x & 0 \\
 0 & 0 & x & 0 & x & x & 0 & 0 & x \\
 0 & 0 & 0 & x & 0 & 0 & x & x & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & x & 0 & x & x & x \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & x & 0 & x & x
 \end{pmatrix}
 \tag{5.29}$$

'x' angiver et element forskellig fra 0. Det fremgår af ligning (5.29) at mange af elementerne i matricen er 0. Det bemærkes dog, at alle diagonalelementerne er forskellig fra 0.

Dette ligningssystem skal løses ved hjælp af matrix løserne. Implicitte metoder fører til en mere kompliceret opbygning af model koden, men fordelene er, at der ikke længere er begrænsninger på tidsskridtet.

Løsning af matricer er en matematisk disciplin i sig selv, og de forskellige numeriske koder anvender forskellige metoder. I de senere år har der været en stigende interesse for at simulere stadig mere komplekse og større systemer i tre dimensioner, hvilket har stimuleret en udvikling af mere robuste og effektive matrixløserne. Traditionelt er matrix ligninger blevet løst ved hjælp af *direkte metoder* så som Gauss elimination og den såkaldte LU dekomposition. Selv om disse metoder kan udnytte, at matricen har en båndstruktur, er de beregningstunge og pladskrævende og i realiteten ikke anvendelige for store 3D problemer. I stedet anvendes *iterative metoder*, og som navnet antyder, foregår løsningen i en iterativ proces, hvor løsningen gentages et antal gange indenfor hvert tidsskridt indtil ændringen mellem iterationer er mindre end et angivet tolerancekriterium. Der er udviklet en række metoder herunder bl.a. Jacobi, Gauss-Seidel, "alternating direction implicit ADI" og "successive overrelaxation SOR". En af de nyere metoder er den såkaldte "preconditioned conjugate gradient method PCG". Almindelige brugere af veldokumenterede grundvandsmodelkoder behøver sædvanligvis ikke i detaljer at forholde sig til løsningsmetoden. I de fleste koder er der mulighed for at vælge blandt nogle få udvalgte ligningsløserne. Under forudsætning af at metoderne er implementeret korrekt, er det stabiliteten af metoden og beregningstiden, der er de interessante parametre. En meget pragmatisk måde at vælge løsningsmetoden på, er derfor ad-hoc at afprøve de metoder koden giver mulighed for at anvende og teste for følsomheden af udvalgte numeriske parametre f.eks. iterationskriteriet, og på grundlag af dette vælge den mest velegnede metode.

5.6 SUPPLERENDE LITTERATUR

Anderson, M.P. and W.W. Woessner, *Applied Groundwater Modeling. Simulation of Flow and Advective Transport*, Academic Press, 1992

Freeze, R.A, and J.A. Cherry, *Groundwater*, Prentice-Hall, 1979.

Fetter, C.W., *Applied Hydrogeology*, Prentice Hall, 1994.

Kinzelbach, W., *Groundwater modelling*, Elsevier, 1986.

Press, W.H., B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, and W.T.Vetterling, *Numerical recipes*, Cambridge University Press, Cambridge, 1987.