การสร้างสมการของแบบจำลองการแพร่กระจาย

1. สมการพื้นฐานของแบบจำลอง (Model Equation)

จากสมการสมดุลมวลสาร (3) ถ้าให้แหล่งกำเนิดของสาร (Source Term, R_c) แทนด้วย $(-KC + R)$ ซึ่ง K คือ อัตราการย่อยสลาย (Decaying Rate) และ R คือ อัตราการเกิดของสาร (Regenerate Rate) จะได้สมการสมดุลมวลสารดังนี้ (Liengcharernsit, 1979)

สมการการสมดุลมวลสาร (Substance Balance Equation)

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{A}\frac{\partial (QC)}{\partial x} - \frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(AK_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + KC - R = 0 \qquad (79)$$

2. การกำหนดขอบเขตพื้นที่ของลำน้ำ

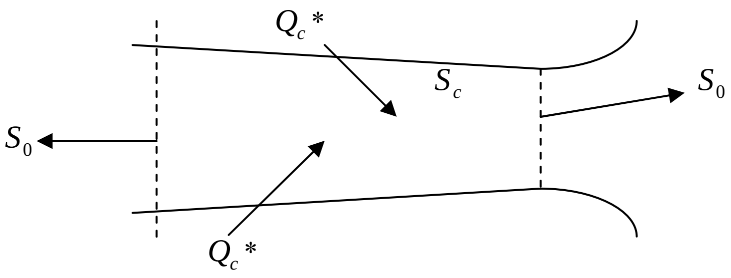
สำหรับการแบ่งขอบเขตพื้นที่ลำน้ำของแบบจำลองการแพร่กระจาย สามารถแบ่งออกได้เป็น 2 ประเภทเช่นกัน ดังนี้

1) บริเวณขอบเขตปิดหรือชายฝั่ง (Closed Boundary , S_c) เป็นบริเวณที่สามารถกำหนดปริมาณการระบายมวลสาร (Dispersive Flux) ลงในขอบเขตนั้นได้ นั้นคือ

$$Q_c \;=\; Q_c^* \qquad \text{บนขอบเขต } S_c \qquad (80)$$

2) บริเวณขอบเขตเปิด (Open Boundary , S_0) เป็นขอบเขตที่สามารถกำหนด หรือทราบค่าการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของสาร นั้นคือ

$$C \;=\; C^* \qquad \text{บนขอบเขต } S_0 \qquad (81)$$



ภาพที่ 13 การแบ่งประเภทขอบเขตพื้นที่ของแหล่งน้ำสำหรับแบบจำลองการแพร่กระจาย

3. การพัฒนาสมการเศษเหลือแบบถ่วงน้ำหนัก (Weighted Residual Equation)

สำหรับขั้นตอนการพัฒนาสมการเศษเหลือแบบถ่วงน้ำหนักของแบบจำลองการแพร่กระจายจะใช้วิธีเดียวกับ แบบจำลองอุทกพลศาสตร์ ดังนี้

จากสมการสมดุลมวลสาร (79) เราสามารถเขียนให้อยู่ในรูปอย่างง่ายได้ดังนี้

$$F_c(\bar{h}, \bar{q}, C) = 0 \qquad (82)$$

เมื่อ $\bar{h}$ และ $\bar{q}$ เป็นค่าที่ได้จากการคำนวณโดยแบบจำลองทางอุทกพลศาสตร์

จากนั้นแทนค่า C ด้วยผลเฉลยโดยประมาณ (Approximate Solution) ซึ่งเขียนในเทอมของค่าที่จุดต่อต่างๆ ได้ดังนี้

$$\hat{c} = \sum_{i=1}^{n} N_i C_i = \underline{N}^T \underline{C} \qquad (83)$$

เมื่อ $\hat{c}$ = ผลเฉลยโดยประมาณของ c

C_i = ค่าความเข้มข้นของมวลสารในน้ำที่ Node i

$\underline{C}$ = Matrix ของ C_i

จะเกิดค่าเศษเหลือเนื่องจากค่าผลเฉลยโดยประมาณ ดังนี้

$$R_c = F_c(\bar{h}, \bar{q}, \hat{c}) - F_s(\bar{h}, \bar{u}, C) = F_c(\bar{h}, \bar{q}, \hat{c}) \qquad (84)$$

และได้สมการเศษเหลือถ่วงน้ำหนัก ดังนี้

$$G_c = \int_L \left\{ \underline{N} F_c(\bar{h}, \bar{q}, \hat{c}) \right\} dx = 0 \qquad (85)$$

สามารถเขียนในรูปสมบูรณ์ได้ ดังนี้

$$G_c = \int_L \underline{N}^e \left\{ \frac{\partial \hat{c}}{\partial t} + \frac{\bar{q}}{B\bar{h}} \frac{\partial \hat{c}}{\partial x} - K_x \frac{\partial^2 \hat{c}}{\partial x^2} + K\hat{c} - R \right\} dx = 0 \qquad (86)$$

4. <u>การเลือกฟังก์ชันการประมาณภายในเอลิเมนต์ (Element Interpolation Function)</u>

สำหรับฟังก์ชันการประมาณภายในเอลิเมนต์ของแบบจำลองการแพร่กระจายจะใช้ฟังก์ชันเดียวกับแบบจำลองอุทกพลศาสตร์ เมื่อ

$$\hat{c}^e = N_1 C_1^e + N_2 C_2^e = \underline{N}^{eT} \underline{C}^e \qquad (87)$$

$$\bar{h}^e = N_1 \bar{H}_1^e + N_2 \bar{H}_2^e = \underline{N}^{eT} \underline{\bar{H}}^e \qquad (88)$$

$$\bar{q}^e = N_1 \bar{Q}_1^e + N_2 \bar{Q}_2^e = \underline{N}^{eT} \underline{\bar{Q}}^e \qquad (89)$$

เมื่อ $$\underline{C}^e = \left\{ C_1^e \quad C_2^e \right\} \qquad (90)$$

$$\underline{\bar{H}}^e = \left\{ \bar{H}_1^e \quad \bar{H}_2^e \right\} \qquad (91)$$

$$\underline{\bar{Q}}^e = \left\{ \bar{Q}_1^e \quad \bar{Q}_2^e \right\} \qquad (92)$$

โดยค่าที่มีเครื่องหมาย bar ได้แก่ $\bar{h}^e$ และ $\bar{q}^e$ จะหมายถึง ค่าที่ได้จากการคำนวณของแบบจำลองอุทกพลศาสตร์ จากนั้นแทนค่า $\hat{c}^e$, $\bar{h}^e$ และ $\bar{q}^e$ ลงในสมการ (87) ได้

$$G_c^e = \int_L \underline{N}^{eT} \frac{\partial(\underline{N}^{eT}\underline{C}^e)}{\partial t} dx + \int_L \underline{N}^e \underline{N}^{eT} \left(\frac{\overline{\underline{Q}}^e}{B^e \overline{\underline{H}}^e} \right) \frac{\partial(\underline{N}^{eT}\underline{C}^e)}{\partial x} dx - \overline{K}_x^e \int_L \underline{N}^e \frac{\partial^2(\underline{N}^{eT}\underline{C}^e)}{\partial x^2} dx$$

$$+ \overline{K}^e \int_L \underline{N}^e (\underline{N}^{eT}\underline{C}^e) dx - \overline{R}^e \int_L \underline{N}^e dx \tag{93}$$

เทอม R^e เป็นอัตราการระบายของสารลงสู่ลำน้ำต่อหน่วยปริมาตรสามารถเขียนได้ในเทอมของ S^e และ V^e ได้ดังนี้

$$R^e = \frac{S^e}{V^e} \tag{94}$$

เมื่อ S^e = ปริมาณสารที่ระบายลงสู่เอลิเมนต์ต่อหน่วยเวลา (กรัมต่อวินาที)

V^e = ปริมาตรของเอลิเมนต์ (ลูกบาศก์เมตร)

ในกรณีที่มีลำน้ำสาขาไหลเข้าที่เอลิเมนต์ e โดยมีปริมาตรการไหลเท่ากับ R^e และความเข้มข้นของสารเท่ากับ C^e เทอม R^e จะมีค่า ดังนี้

$$R^e = \frac{S^e + Q_x^e C_x^e}{V^e} \tag{95}$$

เทอม $- \overline{K}_x^e \int_L \underline{N}^e \frac{\partial^2(\underline{N}^{eT}\underline{C}^e)}{\partial x^2} dx$ สามารถใช้การอินทิเกรทแยกส่วน(By Parts Integral) ได้ ดังนี้

$$-\overline{K}_x^e \int_L \underline{N}^e \frac{\partial^2(\underline{N}^{eT}\underline{C}^e)}{\partial x^2} dx = -\left(\overline{K}_x^e \underline{N}^e \frac{\partial(\underline{N}^{eT}\underline{C}^e)}{\partial x}\Big| x = L\right) + \left(\overline{K}_x^e \underline{N}^e \frac{\partial(\underline{N}^{eT}\underline{C}^e)}{\partial x}\Big| x = 0\right)$$

$$+ \left(\overline{K}_x^e \int_L \frac{\partial N^e}{\partial x} \frac{\partial^2(\underline{N}^{eT}\underline{C}^e)}{\partial x^2} dx\right) \tag{96}$$

จากสมการ(96) สองเทอมทางขวามือเป็นอัตราการแพร่กระจายของสารผ่านพื้นที่หน้าตัดที่ปลายทั้งสองของเอลิเมนต์ สารที่แพร่กระจายออกจากเอลิเมนต์หนึ่งก็จะเข้าสู่เอลิเมนต์ถัดไป ดังนั้นเทอมดังกล่าวสำหรับเอลิเมนต์ที่อยู่ติดกันจะมีค่าเท่ากัน แต่จะมีเครื่องหมายตรงข้ามซึ่งเมื่อ

นำมารวมกันแบบพีชคณิตจะมีค่าเท่ากับศูนย์ ดังนั้นสมการ(93) สามารถเขียนและจัดเทอมใหม่ได้เป็น

$$G_c^e = \int_L (\underline{N}^e \underline{N}^{eT}) dx \frac{\partial \underline{C}^e}{\partial t} + \int_L (\underline{N}^e \underline{N}^{eT} \frac{\overline{Q}^e}{B^e \overline{\underline{H}}^e} \frac{\partial \underline{N}^{eT}}{\partial x}) dx \underline{C}^e + \overline{K}_x^e \int_L (\frac{\partial \underline{N}^e}{\partial x} \frac{\partial \underline{N}^{eT}}{\partial x}) dx \underline{C}^e$$
$$+ \overline{K}^e \int_L (\underline{N}^e \underline{N}^{eT}) dx \underline{C}^e - \overline{R}^e \int_L \underline{N}^e dx \qquad (97)$$

สามารถเขียนอยู่ในรูปอย่างง่ายได้ ดังนี้

$$G_c^e = M^e \frac{\partial \underline{C}^e}{\partial t} + M_{qc}^e \underline{C}^e + M_{kx}^e \underline{C}^e + M_k^e \underline{C}^e - M_R^e \qquad (98)$$

เมื่อ

$$M^e = \int_L (\underline{N}^e \underline{N}^{eT}) dx \qquad (99)$$

$$M_{qc}^e = \int_L (\underline{N}^e \underline{N}^{eT} \frac{\overline{Q}^e}{B^e \overline{\underline{H}}^e} \frac{\partial \underline{N}^{eT}}{\partial x}) dx \qquad (100)$$

$$M_{kx}^e = \overline{K}_x^e \int_L (\frac{\partial \underline{N}^e}{\partial x} \frac{\partial \underline{N}^{eT}}{\partial x}) dx \qquad (101)$$

$$M_k^e = \overline{K}^e \int_L (\underline{N}^e \underline{N}^{eT}) dx \qquad (102)$$

$$M_R^e = \overline{R}^e \int_L \underline{N}^e dx \qquad (103)$$

5. สร้างระบบสมการไฟไนต์เอลิเมนต์ (System of Finite Element Equation)

สำหรับแบบจำลองการแพร่กระจายจะได้ระบบสมการไฟไนต์เอลิเมนต์ของพื้นที่ศึกษาดังนี้

$$G_c = \sum_{e=1}^{I} \{ M^e \frac{\partial \underline{C}^e}{\partial t} + M_{qc}^e \underline{C}^e + M_{kx}^e \underline{C}^e + M_k^e \underline{C}^e - M_R^e \} = 0 \qquad (104)$$

สามารถเขียนในเทอมเมตริกซ์ของระบบ (System Matrix) ได้ดังนี้

$$G_c = M\,\frac{\partial C}{\partial t} + M_{qc}\,\underline{C} + M_{kx}\,\underline{C} + M_k\,\underline{C} - M_R = 0 \qquad (105)$$

สามารถเขียนให้สั้นลงได้ดังนี้

$$G_c = M\,\frac{\partial C}{\partial t} + E_c(\bar{h},\bar{q})\,\underline{C} - M_R = 0 \qquad (106)$$

เมื่อ $$E_c(\bar{h},\bar{q}) = M_{qc} + M_{kx} + M_k \qquad (107)$$

6. <u>ขั้นตอนการคำนวณ (Solution Technique)</u>

6.1 สภาวะคงที่ (Steady State)

สำหรับสภาวะคงที่ (Steady State) เทอม $\frac{\partial C}{\partial t}$ จะมีค่าเท่ากับ 0 จากสมการไฟไนต์เอลิเมนต์ของแบบจำลองการแพร่กระจาย (106) สามารถหาค่า C ได้จาก

$$\underline{C} = E_c(\bar{h},\bar{q})^{-1}.M_R \qquad (108)$$

ขั้นตอนการทำงานของแบบจำลองการแพร่กระจายที่สภาวะคงที่ สามารถเขียนให้อยู่ในรูปผังการทำงานได้ ดังภาพที่ 14

6.2 สภาวะไม่คงที่ (Unsteady State)

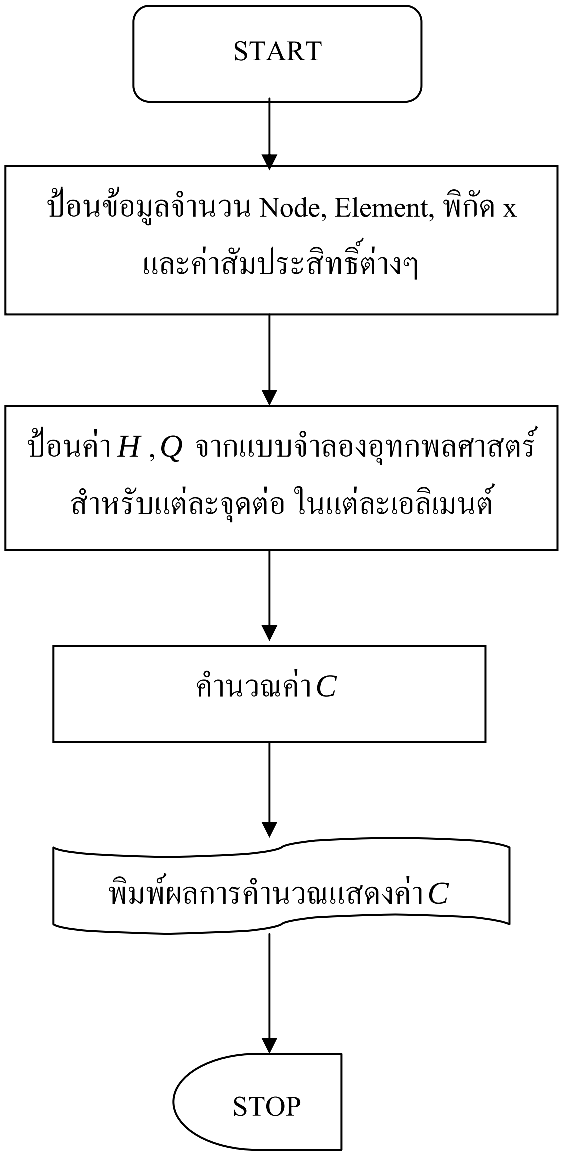
สภาวะไม่คงที่ สามารถคำนวณได้โดยใช้วิธี EULER's time Integration Scheme จากสมการที่ (106) จะได้

$$\frac{M}{\Delta t}\left\{\underline{C}^{t+\Delta t} - \underline{C}^{t}\right\} + E_c(\bar{h},\bar{q})\left\{\frac{\underline{C}^{t+\Delta t} + \underline{C}^{t}}{2}\right\} - M_R = 0 \qquad (109)$$

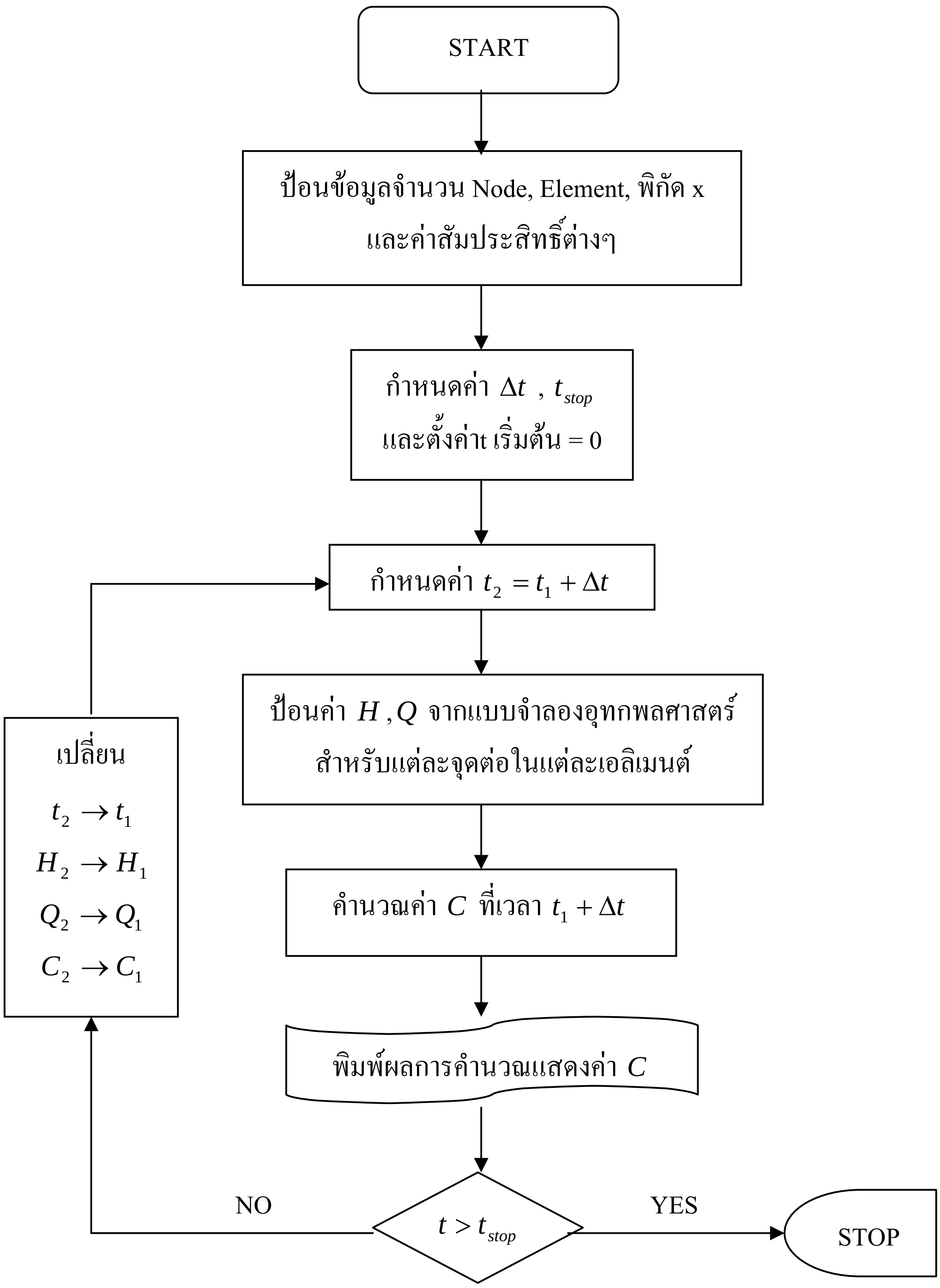
จัดรูปสมการใหม่จะได้

$$\underline{C}^{t+\Delta t} = \left\{\frac{M}{\Delta t} + \frac{E_c(\bar{h}^t, \bar{q}^t)}{2}\right\}^{-1} \left[\left\{\frac{M}{\Delta t} - \frac{E_c(\bar{h}^t, \bar{q}^t)}{2}\right\}\underline{C}^t + M_R^t\right] \tag{110}$$

ขั้นตอนการทำงานของแบบจำลองการแพร่กระจายที่สภาวะไม่คงที่ สามารถเขียนให้อยู่ในรูปผังการทำงานได้ ดังภาพที่ 15



<u>ภาพที่ 14</u> ผังการทำงานแบบจำลองการแพร่กระจายที่สภาวะคงที่



<u>ภาพที่ 15</u> ผังการทำงานแบบจำลองการแพร่กระจายที่สภาวะไม่คงที่