



ΔΗΜΟΚΡΙΤΕΙΟ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΡΑΚΗΣ

DEMOCRITUS
UNIVERSITY
OF THRACE

ΔΗΜΟΚΡΙΤΕΙΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΡΑΚΗΣ

ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ

ΤΜΗΜΑ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΥΔΡΑΥΛΙΚΩΝ ΕΡΓΩΝ



Υπολογιστική Μηχανική Ρευστών

Θεωρία και Εφαρμογές για Πολιτικούς Μηχανικούς

Εξάμηνο: **9^ο**

Κωδικός: **TMB329**

Μάθημα: **Επιλογής ΤΥΕ**

Διάλεξη **Δ.7. Μοντέλα Διεργασιών Μεταφοράς Ρύπων**

Διδάσκων υπεύθυνος μαθήματος:

Χρήστος Β. Μακρής

Επίκουρος Καθηγητής (επί θητεία)

ΔΠΘ

Διπλ. Πολιτικός Μηχανικός ΑΠΘ

Ειδίκευση: Υδραυλική & Περιβαλλοντική Τεχνική

ΜΔΕ Τεχνολογία Υδατικών Πόρων ΕΜΠ

Ειδίκευση: Διαχείριση Παράκτιας Ζώνης

Δρ. Πολιτικός Μηχανικός ΑΠΘ

Ειδίκευση: Υπολογιστική Ρευστοδυναμική - Κυματομηχανική

Δ.7. Διάρθρωση Παρουσίασης

1. Διεργασίες μεταφοράς
2. Καθορισμός Έννοιας Μεταφοράς
3. Οριζόντια Μεταφορά – Μεταγωγή
4. Μοριακή Διάχυση
5. Συναγωγή
6. Μεταφορά + Διάχυση
7. Τυρβώδης Διάχυση
8. Διάτμηση
9. Τυρβώδης Διασπορά
10. Συμπαράσυρση
11. Εξίσωση Μοντέλου Ποιότητας H_2O
12. Μεταφορά και ανάμιξη διαλυμάτων
13. Μοντέλο διάχυσης - διασποράς
14. Οριζόντια - κατακόρυφη ανάμιξη
15. Στρωμάτωση στήλης νερού
16. Όροι πηγής/απώλειας διαλύματος

Δ.7. Διάρθρωση Παρουσίασης

17. Μέθοδος του ιχνηθέτη
18. Διασπορά ρύπων - ποιότητα υδάτων
19. Διασπορά σε ποταμούς
20. Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών
21. Αριθμητικά Σχήματα
22. Αριθμητική μέθοδος Tracer-2D
23. Επίλυση αριθμητικών μεθόδων
24. Διασπορά με μοντέλο ιχνηθέτη
25. Βιβλιογραφία

Δ.7.1. Διεργασίες μεταφοράς

Βασικές Υδροδυναμικές/Υδρολογικές Διεργασίες Μεταφοράς

Οι φυσικές διεργασίες ροής των υδάτινων σωμάτων προκαλούν μεταφορά, ανάμιξη και ανταλλαγή ρύπων ή φυσικών ουσιών με άλλα μέσα/φορείς και υδάτινες μάζες, με εφαρμογή σε φυσικά υδατικά περιβάλλοντα. Μεταξύ των υδρολογικών/υδροδυναμικών **διεργασιών μεταφοράς (transport processes)** ξεχωρίζουν:

- **Οριζόντια μεταφορά ή μεταγωγή (Advection)**

Επιβαλλόμενη μεταφορική κίνηση από ρεύματα νερού όπως σε ποταμό ή παράκτια ύδατα.

- **Συναγωγή (Convection)**

Κατακόρυφη (κυρίως) μεταφορά που προκαλείται από υδροστατική αστάθεια, όπως η επαφή μαζών διαφορετικής θερμότητας/πυκνότητας ή κάτω από την επιφάνεια ψυχρού νερού σε μια λίμνη.

- **Μοριακή Διάχυση (Molecular Diffusion)**

Η τυχαία διασκόρπιση (scattering) των σωματιδίων ρυπαντών λόγω των τυχαίων μοριακών κινήσεων, που μπορεί να περιγραφούν από το νόμο του Fick (κλασική εξίσωση διάχυσης).

- **Τυρβώδης Διάχυση (Turbulent Diffusion)**

Η τυχαία διασκόρπιση (scattering) των σωματιδίων ρυπαντών λόγω τυρβώδους κίνησης, που θεωρείται περίπου σε αναλογία με τη μοριακή διάχυση, αλλά με (πολύ μεγαλύτερους) συντελεστές τυρβώδους κινηματικής διάχυσης.

Δ.7.1. Διεργασίες μεταφοράς

Βασικές Υδροδυναμικές/Υδρολογικές Διεργασίες Μεταφοράς

– Διάτμηση (Shear)

Η μεταγωγή ρευστού λόγω διαφορικών ταχυτήτων σε διαφορετικές θέσεις. Π.χ. πρότυπο κατανομής ταχύτητας για τυρβώδη ροή: νερό ρέει ταχύτερα με την αύξηση της ανύψωσης πάνω από πυθμένα και οριακή στοιβάδα. Αλλαγές σε μέγεθος και κατεύθυνση της ταχύτητας του ρεύματος με το βάθος σε πολύπλοκες τυρβώδεις ροές.

– Διασπορά (Dispersion)

Η διασκόρπιση (scattering) των σωματιδίων ή ενός νέφους μολυσματικών ουσιών λόγω της συνδυασμένης επίδρασης της οριζόντιας μεταφοράς, συναγωγής, διατμητικής ροής και της εγκάρσιας (στην κίνηση) διάχυσης.

– Ανάμιξη (Mixing)

Συνδυασμός διάχυσης και διασποράς όπως περιγράφονται παραπάνω με χαρακτηριστικά την τυρβώδη διάχυση σε φλέβες και πλούμια. Γενικά κάθε διεργασία που προκαλεί μία περιορισμένη μάζα νερού να αναμειγνύεται ή να διαλύεται σε/από άλλες (συνήθως μεγαλύτερες) μάζες υδάτων με άλλα φυσικοχημικά χαρακτηριστικά.

– Συμπαράσυρση Σωματιδίων (Particle Entrainment)

Το ταυτόχρονο σήκωμα και παραλαβή σωματιδίων, όπως ιζήματα ή εκτρίμματα ή οργανικό υλικό, από τον πυθμένα ενός υδάτινου σώματος με τυρβώδη ροή. Η παράσυρση εγκλωβισμένου υλικού σε μάζες υδάτινων εκροών από τη ρευστή μάζα του αποδέκτη, πάνω στη διεπιφάνεια/μέτωπο επαφής των δύο υγρών.

Δ.7.1. Διεργασίες μεταφοράς

Λοιπές Βασικές Διεργασίες Μεταφοράς

– Καθίζηση Σωματιδίων (Particle Settling)

Η βύθιση/κατείσδυση (ή επαναιώρηση) στη στήλη νερού σωματιδίων που έχουν πυκνότητες διαφορετικές από το υγρό περιβάλλον, όπως κόκκοι άμμου ή νεκρό πλαγκτόν. Σε λίμνες και ωκεανούς αυτός μπορεί να είναι ο κυρίαρχος μηχανισμός μεταφοράς θρεπτικών συστατικών προς τον πυθμένα και τα βενθικό υλικό/ίζημα.

– Εξάτμιση (Evaporation)

Η μεταφορά υδρατμών από νερό ή έδαφος στην ατμόσφαιρα.

– Ακτινοβολία (Radiation)

Η ροή ακτινοβολούμενης ενέργειας (ως π.χ. θερμότητα), όπως π.χ. στην επιφάνεια του νερού από τον ήλιο.

Δ.7.1. Διεργασίες μεταφοράς

Πρακτικά Υδροδυναμικά Μορφώματα και Τύποι Ροής σε Διεργασίες Μεταφοράς

– Ανωστικές φλέβες και Πλούμια

Για να αυξηθεί η αραίωση μιας εκροής στα περιβάλλοντα ύδατα, οι μηχανικοί χρησιμοποιούν κατασκευές που παράγουν βυθισμένους πίδακες (φλέβες) λυμάτων. Αν το υγρό του αποδέκτη είναι ελαφρύτερο από το εκρέον αυτές ονομάζονται ανωστικές φλέβες. Αν η αρχική ορμή εκροής των λυμάτων είναι μικρή, τότε το πρότυπο ροής ονομάζεται πλούμιο. Η ανάλυση των ανωστικών φλεβών και πλουμίων εξαρτάται όχι μόνο από τις παραμέτρους τους (μέγεθος, σύσταση κ.λπ.) αλλά και τις συνθήκες περιβάλλοντος (στρωμάτωση πυκνότητας, κατακόρυφο προφίλ ρευμάτων κ.λπ.). Οι εν λόγω ροές με υδρολογικό και υδροδυναμικό ενδιαφέρον είναι πρακτικά τυρβώδεις με έντονους 3-D στροβιλισμούς και δίνες. Για μεγάλες εκροές (π.χ. από αγωγούς ΕΕΛ) χρησιμοποιείται διάταξη πολλαπλών ακροφυσίων/ανυψωτήρων (διαχυτήρας) για δημιουργία σειράς φλεβών, η οποία συχνά προκαλεί γρήγορες άμεσες αρχικές αραιώσεις της τάξης του 10^2 (όγκου μίγματος διαιρούμενο με αρχικό όγκο εκροής).

– Στρωματωμένες ροές πυκνότητας

Πολλά προβλήματα στην ανάμιξη στο φυσικό περιβάλλον είναι συχνά πολύπλοκα με στρωμάτωση λόγω της έντονης διακύμανσης της θερμοκρασίας (θερμοκλινές) στις λίμνες και τις υδατοδεξαμενές, ή τα κατακόρυφα προφίλ πυκνότητας των υδάτων (πυκνοκλινές) στις εκβολές των ποταμών και την παράκτια ζώνη. Αυτή η εσωτερική κατακόρυφη δομή έχει πολύ μεγάλη επίδραση στα μέσα πεδία ροής και στην τυρβώδη ανάμειξη και διασπορά. Υπάρχει μια ισχυρή αλληλεπίδραση των διεργασιών σε ένα υδάτινο οικοσύστημα: δηλ. η ανάμιξη εξαρτάται από το πεδίο ροής και τη στρωμάτωση, αλλά και η ροή και η στρωμάτωση εξαρτώνται από την ανάμιξη.

Δ.7.1. Διεργασίες μεταφοράς

Τεχνικές Προσεγγίσεις για Διεργασίες Μεταφοράς

Ανάλυση τάξης μεγέθους

Η διαδικασία ανάπτυξη γρήγορων προσεγγιστικών λύσεων βασίζεται στην «ανάλυση τάξης μεγέθους» ή «ανάλυση κλίμακας» (scaling) . Διαχείριση των εκθετικών τιμών μιας μεταβλητής: Νόμοι κλίμακας – δυνάμεις του 10 – Διαστατική ανάλυση (dimensional analysis). Αριθμοί Reynolds, Froude, Richardson, Peclet κ.λπ.

Αποτελέσματα: σωστή εξάρτηση των σημαντικότερων παραμέτρων με άμεσες αριθμητικές εκτιμήσεις, με μεγάλο περιθώριο σφάλματος, αλλά ικανοποιητικό πρώτο βήμα κατά προσέγγιση.

Μοντελοποίηση Υδροδυναμικής Ροής με Φαινόμενα Μεταφοράς Ουσιών

Περίπλοκες διαφορικές εξισώσεις με μερικές παραγώγους

Μοντέλα διάχυσης – διασποράς ρύπων

Μοντέλα μεταφοράς υδάτινων μαζών και ρύπων

Μοντέλα υδροδυναμικής κίνησης ρευστών (Navier – Stokes)

Μοντέλα Ποιότητας Νερών

Ημιαναλυτικές σχέσεις διάλυσης ρυπαντών λόγω ανάμιξης

Αποτελέσματα: σωστή φυσική/μαθηματική προσέγγιση με ακρίβεια, αλλά μεγάλος υπολογιστικός φόρτος

Δ.7.2. Καθορισμός Έννοιας Μεταφοράς

Μεταφορά (Transport): διάχυση (diffusion) + διασπορά (dispersion)

Τα φαινόμενα της μεταφοράς, διάχυσης και διασποράς μιας ουσίας μέσα στο υδάτινο περιβάλλον είναι μεγάλης σημασίας για τα προβλήματα της ρύπανσης των φυσικών ρευμάτων, λιμναίων και θαλάσσιων αποδεκτών.

Φυσικοί αποδέκτες αποβλήτων και λυμάτων: Νερό διαλύει και μεταφέρει ουσίες μακριά από τα σημεία πηγών με ταυτόχρονη ελάττωση της συγκέντρωσής τους.

Η **βασική ιδέα της μεταφοράς και διάχυσης** μιας ουσίας, μέσα σε ένα ρευστό είναι ότι, στατιστικά, η **απόσταση μεταξύ δύο γειτονικών σωματιδίων της ουσίας αυξάνεται μέσα στο χρόνο**. Γίνεται δηλαδή **ανάμιξη και μετακίνηση** των διαφόρων **σωματιδίων της ουσίας μέσα στο ρευστό**, που μπορεί να είναι ακίνητο ή σε κίνηση.

Η ανάμιξη αυτή γίνεται με τυχαίο τρόπο. Συνέπεια αυτής της κίνησης είναι ότι, εάν τα σωματίδια αυτά έχουν μια ορισμένη βαθμωτή ιδιότητα, όπως είναι η μάζα, η θερμοκρασία κ.α., τότε η ιδιότητα αυτή μεταφέρεται στις διάφορες περιοχές του ρευστού: μεταφορά λόγω διάχυσης.

Θα ασχοληθούμε κυρίως με τη **μάζα** σαν **μεταφερόμενη ιδιότητα** (άρα τις **συγκεντρώσεις ρυπαντών** στο νερό)

Θα εξηγηθούν βασικές έννοιες και εξισώσεις μεταφοράς, μοριακής και τυρβώδους διάχυσης, καθώς και η διαφορά μεταξύ τυρβώδους διάχυσης και διασποράς.

Θα σχολιαστούν οι **συντελεστές διάχυσης και διασποράς**, που υπεισέρχονται στα μοντέλα ποιότητας.

Δ.7.2. Καθορισμός Έννοιας Μεταφοράς

Συγκέντρωση Ρυπαντή σε Πεπερασμένο Όγκο

Στο εννοιολογικό Σχήμα 3.1 η ύπαρξη μίας ρυπογόνου ουσίας στο νερό μπορεί να θεωρηθεί ως ένα μίγμα μικροσκοπικών σωματιδίων ρύπων και νερού, το καθένα σε διαφορετικό αριθμό, σύμφωνα με τη συγκέντρωση, η οποία καθορίζεται από τον αριθμό σωματιδίων της ρυπαντικής ουσίας που περιέχονται στον **στοιχειώδη όγκο**.

Λόγω διαφόρων φαινομένων που συνδέονται με την εγγενή συμπεριφορά του υδάτινου σώματος και την ανθρώπινη παρέμβαση, η **συγκέντρωση** ποικίλλει από σημείο σε σημείο και από τη μία στιγμή στην άλλη.

Δηλαδή είναι **συνάρτηση** χρόνου και χώρου:

$$c = f(\text{χώρος}, \text{χρόνος}) = c(\mathbf{S}, t) = c(x, y, z, t)$$

If Φ is an elementary water volume and M is the mass of pollutant inside the same volume at the time t_0 , the concentration can be expressed as

$$C = \frac{M}{\Phi} \tag{3.1}$$

Η μάζα του ρυπαντή σε τυχαία στιγμή στο χρόνο t

$$M_t = c_t \cdot \Delta x \Delta y \Delta z, \quad \Phi = V(x, y, z)$$

Στο χρόνο $t + \Delta t$ μάζα του ρυπαντή είναι:

$$M_{t+\Delta t} = (c_{t+\Delta t} - c_t) \cdot \Delta x \Delta y \Delta z$$

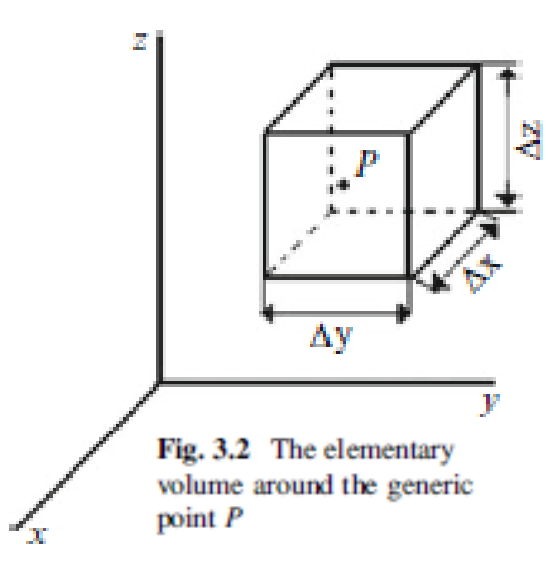


Fig. 3.2 The elementary volume around the generic point P

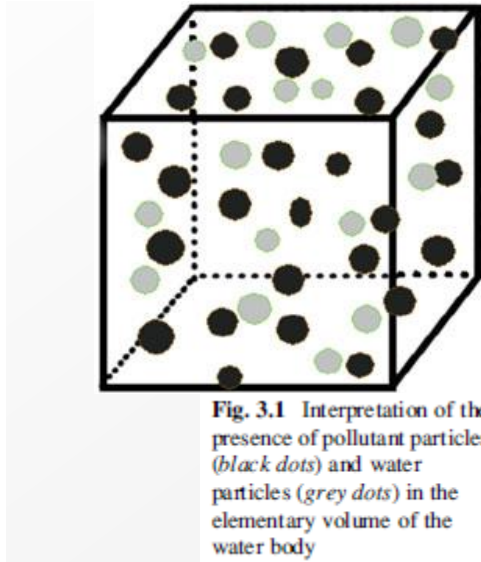


Fig. 3.1 Interpretation of the presence of pollutant particles (black dots) and water particles (grey dots) in the elementary volume of the water body

Δ.7.2. Καθορισμός Έννοιας Μεταφοράς

Μαθηματική έννοια της Μεταφοράς

Βασική αιτία της μεταφοράς είναι η ίδια η **κίνηση του ρευστού**. Η περιγραφή της είναι εύκολη, εάν θεωρήσουμε την **ολική μεταβολή** μέσα στο χρόνο, σε ένα ορισμένο **σημείο (πεπερασμένο όγκο)** του ρευστού, της **συγκέντρωσης c** (πεπλεγμένη συνάρτηση εξαρτώμενη από τις συνιστώσες του χώρου και του χρόνου) μιας ουσίας, δηλαδή τη γνωστή **σωματιδιακή (ολική) παράγωγο (total derivative) Dc/Dt**

ΑΝ στο ρευστό, που κινείται με μια ορισμένη ταχύτητα, μετρήσουμε τη συγκέντρωση μιας ουσίας δείκτη σε ένα ορισμένο σημείο της ροής, τότε η συνολική μεταβολή της συγκέντρωσης, μέσα στο χρόνο, θα είναι άθροισμα δύο επιμέρους μεταβολών:

- μιας μεταβολής μέσα στο χρόνο, που αφορά τη συγκέντρωση στο συγκεκριμένο σημείο και είναι η **μερική ή τοπική παράγωγος (partial derivative) $\frac{\partial c}{\partial t}$**
- μιας μεταβολής, που οφείλεται στη κίνηση του ρευστού και εκφράζει το ποσό της χρονικής μεταβολής της συγκέντρωσης, όπως αυτή κινείται στη διεύθυνση της ροής και με την ίδια ταχύτητα με το ρευστό. Αυτή εκφράζεται στη γενική περίπτωση, σαν άθροισμα όρων της μορφής $\sum_i u_i \frac{\partial c}{\partial x_i}$

u_i : συνιστώσες ταχύτητας

x_i : βασικές διευθύνσεις χωρικών συντεταγμένων

Η **σωματιδιακή παράγωγος** είναι το άθροισμα του ποσού μεταβολής της συγκέντρωσης σε ένα σημείο και της μεταβολής λόγω ταχύτητας.

Κλασική εξίσωση σε

καρτεσιανές συντεταγμένες:

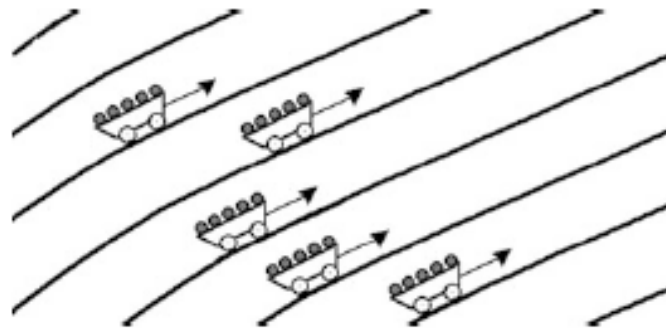
$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z}$$

Δ.7.3. Οριζόντια Μεταφορά - Μεταγωγή

Βασική θεώρηση της Οριζόντια Μεταφοράς – Μεταγωγής (Advection)

Η μεταγωγή (οριζόντια μεταφορά) είναι η **μεταφορά** μιας ουσίας μαζί με την ευρύτερη κίνηση της μάζας του ρευστού που την περιβάλλει. Οι **ιδιότητες** της **ουσίας**, όπως η **ενέργεια**, **μεταφέρονται** με αυτήν την κίνηση και διέπονται από **αρχές διατήρησης**. Π.χ. η μεταφορά ρύπων ή λάσπης σε ένα ποτάμι με τη ροή της υδάτινης μάζας προς τα κατόντη ή γενικά οποιαδήποτε ουσία ή διατηρούμενο μέγεθος/ιδιότητα υλικού, που μπορεί να προσκολληθεί σε μια μάζα υγρού, το οποίο τα συγκρατεί ή τα εμπεριέχει κατά την κίνησή του.

Fig. 3.3 Conceptualisation of the advection transport: the water particles (the “trucks”), moving along the streamlines (solid lines), convey the pollutant particles (the “balls”)



Η οριζόντια μεταφορά (advection) δεν πρέπει να συγχέεται με την πιο περιεκτική διαδικασία της συναγωγής (convection), η οποία είναι ο συνδυασμός των διεργασιών μεταφοράς λόγω μεταγωγής και διάχυσης.

Δ.7.3. Οριζόντια Μεταφορά - Μεταγωγή

Συγκέντρωση Ρυπαντή κατά την Οριζόντια Μεταφορά

Κατά τη διάρκεια της οριζόντιας μεταφοράς, ένα υγρό μεταφέρει κάποια διατηρούμενη ποσότητα ή υλικό μέσω μαζικής κίνησης. Η κίνηση του ρευστού περιγράφεται μαθηματικά με ένα διανυσματικό πεδίο (ταχύτητες) $\mathbf{v}=\mathbf{v}(x,y,z,t)$ και το μεταφερόμενο υλικό περιγράφεται από βαθμωτό πεδίο (συγκεντρώσεις) $C=c(x,y,z,t)$ που δείχνει τη κατανομή του στο χώρο. Δεν περιλαμβάνει τη μεταφορά ουσιών με μοριακή διάχυση.

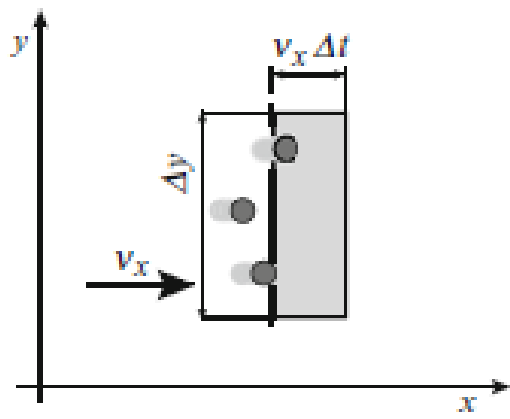


Fig. 3.4 Interpretation of the advection transport in a two-dimensional case ($\Delta z = 1$)

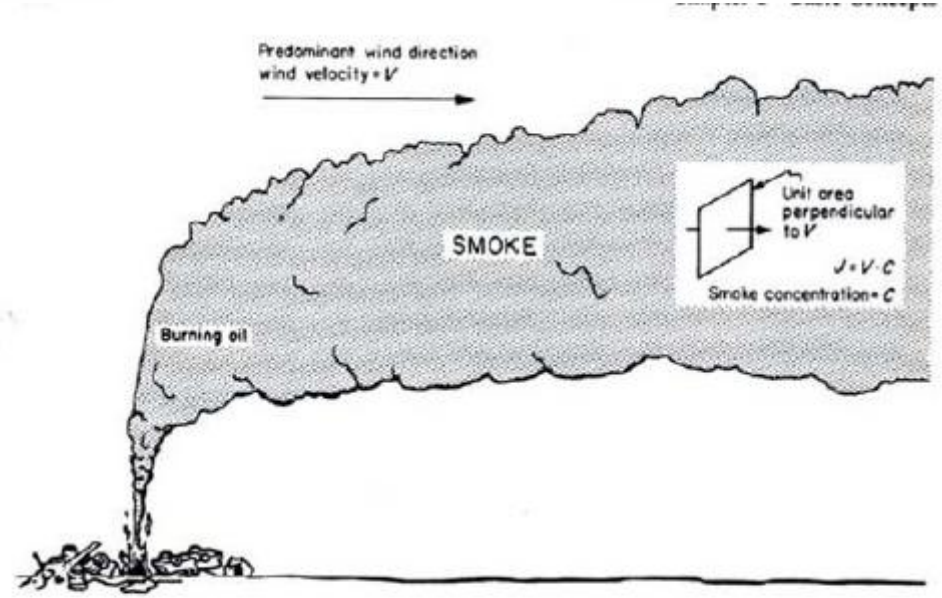


FIGURE 1-5 Advective transport of a smoke plume as shown in Fig. 1-4. The imaginary square frame is oriented perpendicular (\perp) to fluid flow and for convenience has an area of one (in whatever units we prefer— m^2 , ft^2 , etc.). The flux density of smoke, J , is the product of the wind velocity V and the concentration of smoke in the air, C .

Εάν C είναι η συγκέντρωση ρύπων, η μάζα M των ρύπων που διασχίζει αυτή την περιοχή κατά τη διάρκεια του στοιχειώδους χρονικού διαστήματος Δt μπορεί να προσδιοριστεί ποσοτικά ως (2-D περίπτωση):

$$M_{\Delta t} = c \cdot \Delta y \Delta z \cdot v_x \Delta t$$

Δ.7.3. Οριζόντια Μεταφορά - Μεταγωγή

Βασικές Εξισώσεις και Τελεστής Οριζόντιας Μεταφοράς

Η εξίσωση της οριζόντιας μεταφοράς (μεταγωγής) είναι μια μερική διαφορική εξίσωση η οποία ρυθμίζει την κίνηση ενός διατηρούμενου βαθμωτού πεδίου, καθώς προσάγεται/μεταφέρεται από ένα γνωστό διανυσματικό πεδίο ταχύτητας. Αποδίδεται μαθηματικά με τη χρήση του νόμου διατήρησης ενός βαθμωτού μεγέθους (σε μορφή πεδίου) μαζί με το θεώρημα του Gauss για απειροστό/πεπερασμένο όγκο (στο απειροστικό όριο).

Σε καρτεσιανές συντεταγμένες ο **Τελεστής Μεταγωγής** (advective operator) είναι:

$$\mathbf{u} \cdot \nabla = u_x \frac{\partial}{\partial x} + u_y \frac{\partial}{\partial y} + u_z \frac{\partial}{\partial z}$$

Η εξίσωση μεταγωγής για μια συντηρητική ποσότητα που περιγράφεται από ένα βαθμωτό πεδίο ψ εκφράζεται μαθηματικά με μια εξίσωση συνέχειας της μορφής: Το **ανάδελτα** (nabla) ∇ είναι σύμβολο στον διανυσματικό λογισμό (ανάλυση) για 3 βασικούς **διαφορικούς τελεστές**:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\psi \mathbf{u}) = 0$$

κλίσης ($\nabla \cdot$ βαθμωτό μέγεθος = διάνυσμα)

απόκλιση ($\nabla \cdot$ διάνυσμα = βαθμωτό μέγεθος)

στροβιλισμός/περιστροφή ($\nabla \times$ διάνυσμα = διάνυσμα)

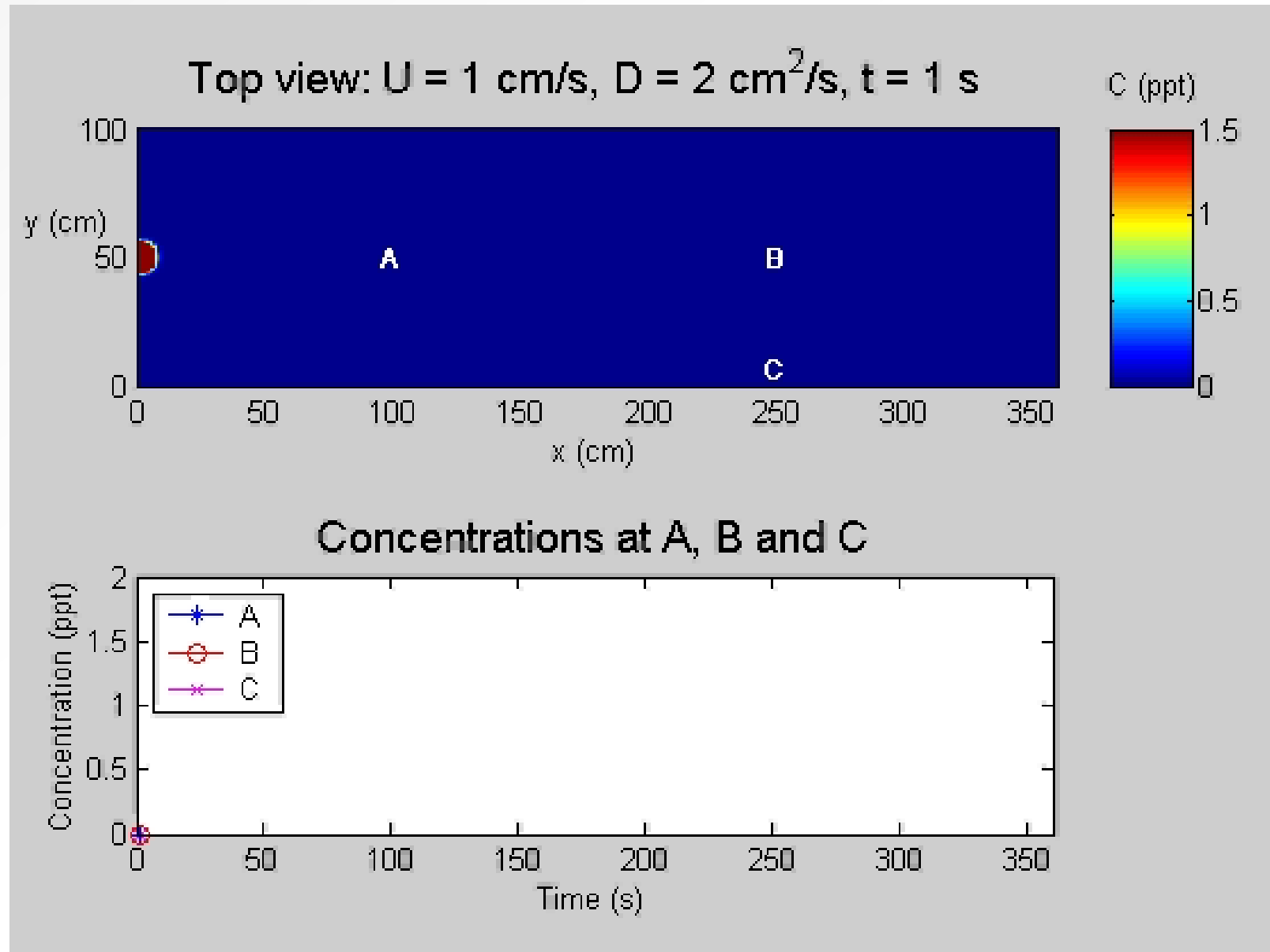
Για ασυμπίεστο ρευστό με μηδενικό τελεστή απόκλισης του διανυσματικού πεδίου ταχύτητας: $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \psi = 0.$$

$\nabla \cdot \mathbf{u}$ ή αλλιώς η **απόκλιση** του **διανυσματικού πεδίου** των **ταχυτήτων** *divu* είναι από φυσικής άποψης η **χωρική μεταβολή** ενός **κινούμενου** στοιχειώδους **όγκου** ελέγχου ενός ρευστού, ανηγμένου ανά μονάδα όγκου.

Δ.7.3. Οριζόντια Μεταφορά - Μεταγωγή

Απεικόνιση φαινομένου



Δ.7.4. Μοριακή Διάχυση

Βασική θεώρηση – Νόμος του Fick

Η μοριακή διάχυση είναι η διεργασία σύμφωνα με την οποία, μια ουσία, που βρίσκεται σε διάλυση ή αιώρηση (διαχεομένη ουσία), κινείται ή οδηγείται μέσα σε μια άλλη ουσία ή διάλυμα (διαχέουσα ουσία). Αυτή η μεταφορά γίνεται μόνο με τυχαία μοριακή κίνηση. Η διαχέουσα ουσία, για τα προβλήματα της ρύπανσης σε υδάτινα οικοσυστήματα, είναι το ίδιο το περιβάλλον στην υγρή του φάση. Η μοριακή διάχυση, αλλά και γενικά η διάχυση, λαμβάνει χώρα όταν υπάρχει διαφορά συγκέντρωσης, της ουσίας που διαχέεται, στα διάφορα σημεία της διαχέουσας φάσης. Η όλη κίνηση διέπεται από το **νόμο του FICK**: Η ποσότητα της ουσίας που μεταφέρεται, κατά μία ορισμένη διεύθυνση x , είναι ανάλογη της μεταβολής της συγκέντρωσης της ουσίας αυτής κατά μήκος της διεύθυνσης x και εκφράζεται με τη σχέση:

$$M_x = -D_\mu \frac{\partial c}{\partial x}$$

$$q = -D \frac{\partial C}{\partial x},$$

$$q = -D \nabla C,$$

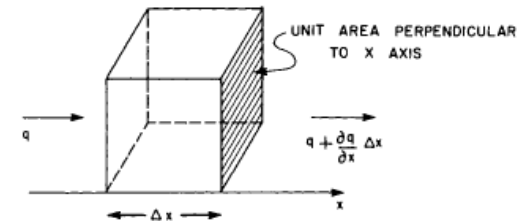


Figure 2.1 The control volume used to derive Eq. (2.3).

M: ποσότητα μάζας που μεταφέρεται κατά τη διεύθυνση x , στη μονάδα επιφάνειας, κάθετης στη διεύθυνση x και στη μονάδα του χρόνου [M/L²T]

D_μ: συντελεστής μοριακής διάχυσης, που εκφράζει την κινητική ιδιότητα της ουσίας για ένα ορισμένο μέσο [L²/T].

Η φυσική σημασία του προσήμου *μείον*, είναι ότι η μεταφορά γίνεται προς τη διεύθυνση των μειωμένων συγκεντρώσεων. Οι τιμές του συντελεστή μοριακής διάχυσης είναι συνάρτηση της φύσης του ρευστού και της θερμοκρασίας του.

Δ.7.4. Μοριακή Διάχυση

Επίλυση διαφορικής εξίσωσης – Τύποι Συγκεντρώσεων

Εάν συνδυάσουμε το νόμο του Fick, με την εξίσωση συνέχειας ή διατήρησης της μάζας, τότε για την περίπτωση που δεν υπάρχει κίνηση του ρευστού:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_{\mu} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

Η λύση της εξίσωσης αυτής, στην περίπτωση ουσίας που διαχέεται σε ποσότητα M , στο χρόνο $t=0$ και στο σημείο $x=0$, δίνεται από τη σχέση:

$$c(x, t) = \frac{M}{S\sqrt{4\pi D_{\mu}t}} \exp\left[-\frac{x^2}{4D_{\mu}t}\right] \quad \text{Για μοναδιαία επιφάνεια:} \\ C(x, t) = (M/\sqrt{4\pi Dt}) \exp - (x^2/4Dt)$$

C: συγκέντρωση της ουσίας για κάθε απόσταση x από την πηγή και σε κάθε χρονική στιγμή t

S: παράμετρος εγκάρσιας διατομής στη διεύθυνση x προς την οποία γίνεται η διάχυση

Στην περίπτωση κίνησης, με μονοδιάστατη στρωτή ροή ταχύτητας u , η εξίσωση λαμβάνει τη μορφή:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = D_{\mu} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad c(x, t) = \frac{M}{S\sqrt{4\pi D_{\mu}t}} \exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{4D_{\mu}t}\right]$$

Για μοναδιαία επιφάνεια:

$$C(x, t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left[-\frac{(x-\xi)^2}{4Dt}\right],$$

Δ.7.4. Μοριακή Διάχυση

Άλλοι Τύποι Συγκεντρώσεων

Η λύση της εξίσωσης αυτής, στην περίπτωση ουσίας που διαχέεται σε ποσότητα M , σε συγκεκριμένο σταθερό σημείο, η εξέλιξή της στο χρόνο t , δίνεται από τη σχέση:

$$C = C_0 \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}} \right) \right)$$

“Erfc” stands for the “complimentary error function,” which is defined by

$$\operatorname{erfc}(Z) = 1 - \operatorname{erf}(Z). \quad (2.38)$$

$$= C_0 \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}} \right) \quad (x > 0).$$

The total concentration at time t is the sum of the contributions at all prior times

$$C = \int_{-\infty}^t \frac{\partial C_0}{\partial \tau} \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{\sqrt{4D(t-\tau)}} \right) d\tau. \quad (2.40)$$

Είσοδος μάζας στον αποδέκτη ως συνάρτηση του χρόνου:

$$C(x, t) = \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^{\infty} \frac{m(\xi, \tau)}{\sqrt{4\pi D(t-\tau)}} \exp \left[-\frac{(x-\xi)^2}{4D(t-\tau)} \right] d\xi d\tau.$$

Δ.7.4. Μοριακή Διάχυση

Επίλυση διαφορικής εξίσωσης σε 2-D και 3-D

Για τα φυσικά ρεύματα όμως, που μας ενδιαφέρει η δισδιάστατη και τρισδιάστατη ροή

Στη γενική περίπτωση, με διάχυση και ταχύτητες προς τις τρεις διευθύνσεις, η εξίσωση λαμβάνει τη μορφή:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = D_{\mu} \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right)$$

$D_{\mu} = \sim 1-5 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{sec}$
 σταθερή τιμή για ομογενές πεδίο

ή με συντεταγμένη μορφή:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_i \frac{\partial c}{\partial x_i} = D_{\mu} \frac{\partial^2 c}{\partial x_i \partial x_i}$$

$D_{\mu} = (D_x, D_y, D_z)$
 για πραγματικό 3-D πεδίο

όπου ο συντελεστής D_{μ} είναι μια βαθμωτή σταθερά.

2-D

$$C = C_1 C_2 = \frac{M}{4\pi t \sqrt{D_x D_y}} \exp\left(-\frac{x^2}{4D_x t} - \frac{y^2}{4D_y t}\right)$$

3-D

$$C(x, y, z, t) = \frac{M}{(4\pi t)^{3/2} (D_x D_y D_z)^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{4D_x t} - \frac{y^2}{4D_y t} - \frac{z^2}{4D_z t}\right)$$

Δ.7.5. Συναγωγή

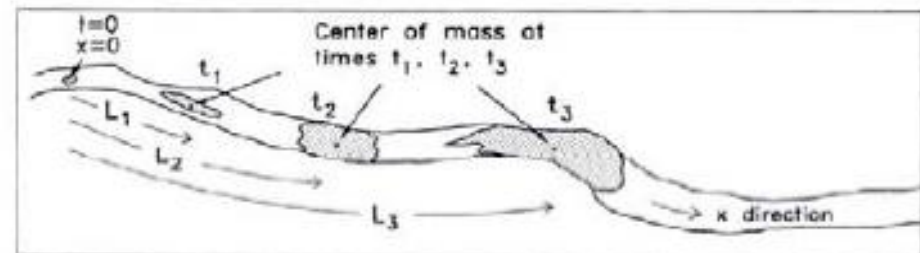
Διαφοροποίηση συναγωγής από έννοιες μεταγωγής και μεταφοράς

Η **συναγωγή (convection)** είναι ο πιο σημαντικός τρόπος μεταφοράς μαζών σε υγρά. Η συναγωγική μεταφορά θερμότητας και μάζας πραγματοποιείται τόσο με τη διάχυση (τυχαία κίνηση Brown των μεμονωμένων σωματιδίων στο ρευστό), όσο και με τη μεταγωγή, όπου ύλη ή θερμότητα μεταφέρονται με την ευρύτερη «μεγαλύτερης κλίμακας» κίνηση των ρευμάτων στο ρευστό, λόγω διαφορών πυκνοτήτων και θερμοκρασιών από το περιβάλλον.

Στο πλαίσιο της μεταφοράς θερμότητας και μάζας, ο όρος «**συναγωγή**» χρησιμοποιείται για να αναφερθεί στο **άθροισμα** της μεταφοράς και της **διάχυσης**. Ως ευρύτερη έννοια στη μηχανική των ρευστών, η συναγωγή αναφέρεται στην κίνηση του υγρού ανεξάρτητα από την αιτία, ενώ ειδικά στη θερμοδυναμική συχνά αναφέρεται ειδικά στη μεταφορά θερμότητας μέσω μετάδοσης (conduction) + μεταγωγής.

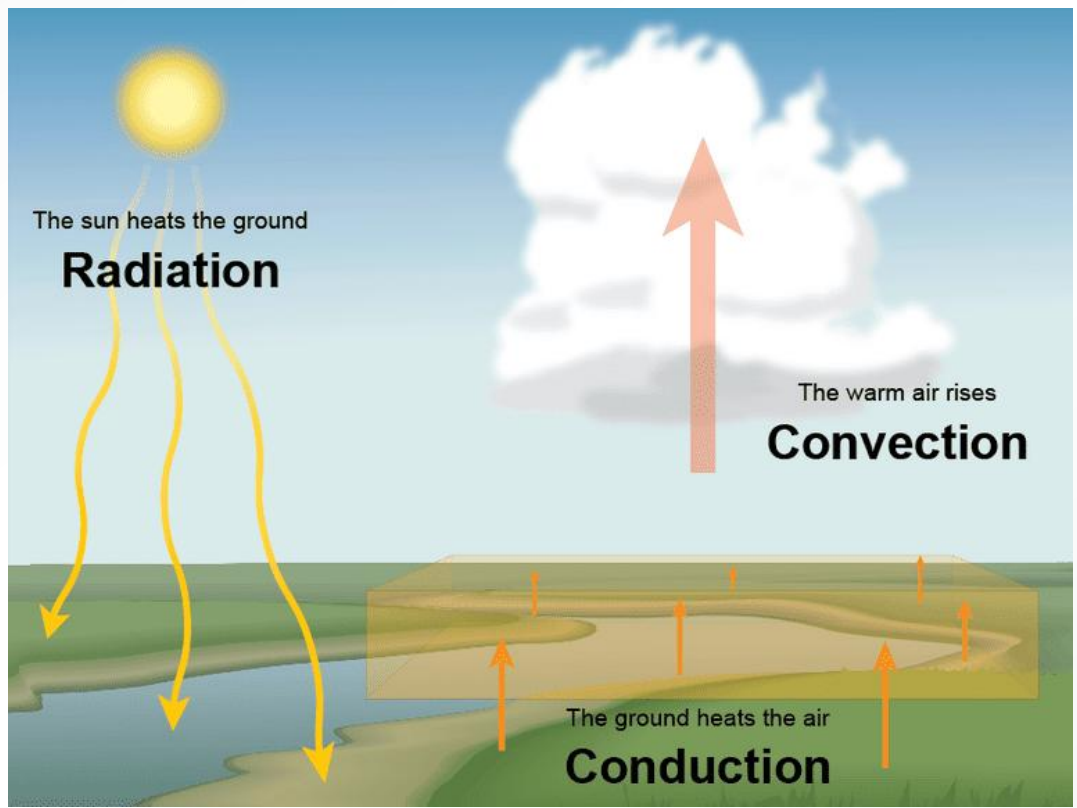
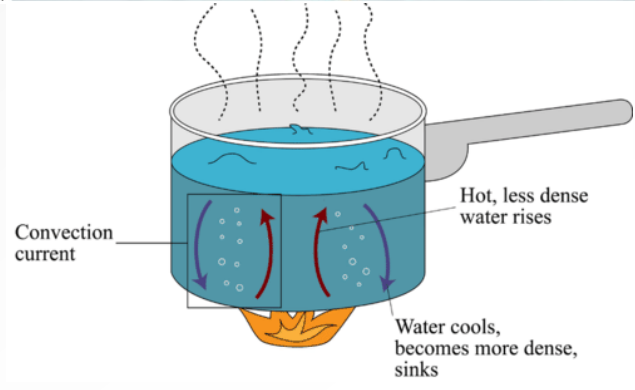
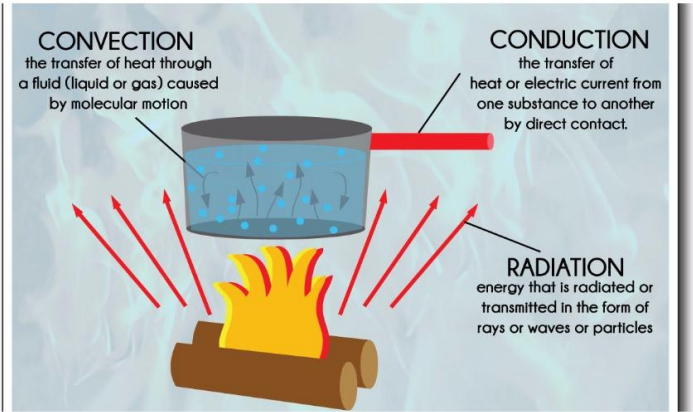
Γενικά, η συναγωγή περιλαμβάνει τη συνολική κίνηση του ρευστού (μαζί με τη διαλυμένη ουσία) ως υπέρθεση (ή άθροισμα) της μαζικής, κυρίως οριζόντιας, κίνησης (μεταγωγή) με την κίνηση των μεμονωμένων σωματιδίων (διάχυση) του διαλυμένου υλικού. Εντούτοις, σε ορισμένες περιπτώσεις στην τελική εξίσωση γενικευμένης μεταφοράς (**transport**), η συναγωγή θεωρείται ότι σημαίνει μόνο φαινόμενα μεταγωγής:

$$\underbrace{\frac{\partial T}{\partial t}}_{\text{local derivative}} + \underbrace{(\vec{V} \cdot \nabla)}_{\text{convective derivative}} T \equiv \frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z}$$



Δ.7.5. Συναγωγή

Τυπικές εικόνες συναγωγής



Δ.7.6. Μεταγωγική Διάχυση

Μεταγωγική/μεταφερόμενη διάχυση (advective diffusion)

Γενική σχέση:

$$q = uC + (-D \partial C / \partial x).$$

advective flux
diffusive flux

Fig. 3.6 Interpretation of the dispersion transport in a two-dimensional ($\Delta z = 1$) stream y

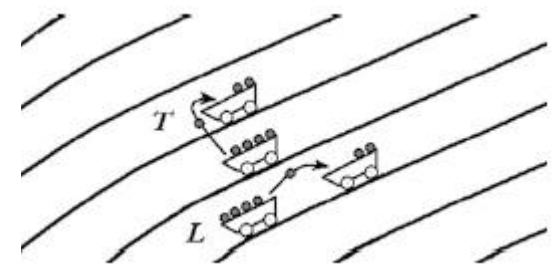
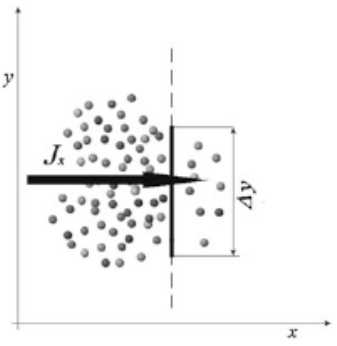


Fig. 3.5 Conceptual aspect of the dispersion pollutant transport

Σε καρτεσιανές συντεταγμένες:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right].$$

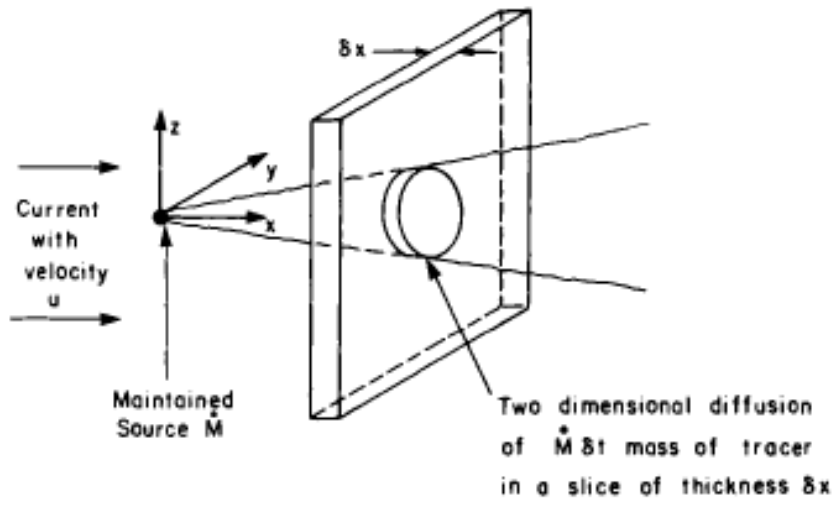


Figure 2.12 Reduction of a three-dimensional problem to two dimensions by considering diffusion in a moving slice.

2-D

$$C(x, y) = \frac{\dot{M}}{u \sqrt{4\pi D x / u}} \exp\left(-\frac{y^2 u}{4 D x}\right)$$

3-D

$$C(x, y, z) = \frac{\dot{M}}{4\pi D x} \exp\left[-\frac{(y^2 + z^2) u}{4 D x}\right].$$

Δ.7.6. Μεταφορά + Διάχυση

Τυπική απεικόνιση της μεταφοράς ως μεταγωγής + διάχυσης

<https://www.youtube.com/watch?v=2PR9fUDEIec>

Τυπική απεικόνιση της μεταφοράς ως διάχυσης + διασποράς

<https://www.youtube.com/watch?v=38SXYyUt6JI>

Δ.7.7. Τυρβώδης Διάχυση

Φιλοσοφία τυρβώδους κίνησης

Χονδροειδής ορισμός για τυρβώδη κίνηση:

Είναι μια φυσική και συχνή κατάσταση της κίνησης ενός ιξώδους ρευστού, όπου οι διάφορες φυσικές παράμετροι εμφανίζουν τυχαίες μεταβολές στο χώρο και στο χρόνο, τέτοιες ώστε, οι μέσες τιμές αυτών να είναι δυνατόν να ορισθούν.

Η τυρβώδης κίνηση χαρακτηρίζεται από την **παρουσία** μέσα στην **κυρίως ροή**, **δευτερευουσών κινήσεων**, **ατάκτων και χαοτικών**, χωρίς καμία εύκολα περιγράψιμη οργάνωση, περιοδική ή μη. Αυτές οι δευτερεύουσες κινήσεις γίνονται αντιληπτές με τις **διακυμάνσεις (στον χρόνο)** που επιφέρουν στις παραμέτρους της ροής.

1) Η τυρβώδης κίνηση εμφανίζεται όταν η στρωτή ροή χάσει τη σταθερότητά/ευστάθειά της και εμφανισθούν αυξομειώσεις στις απειροστές τυχαίες διακυμάνσεις των παραμέτρων της ροής. Μπορεί ακόμη να οφείλεται σε μια εξωτερική δράση στις πεπερασμένες διακυμάνσεις των παραμέτρων ροής. Η φάση αυτή είναι γνωστή σαν **φάση παραγωγής του τυρβώδους**.

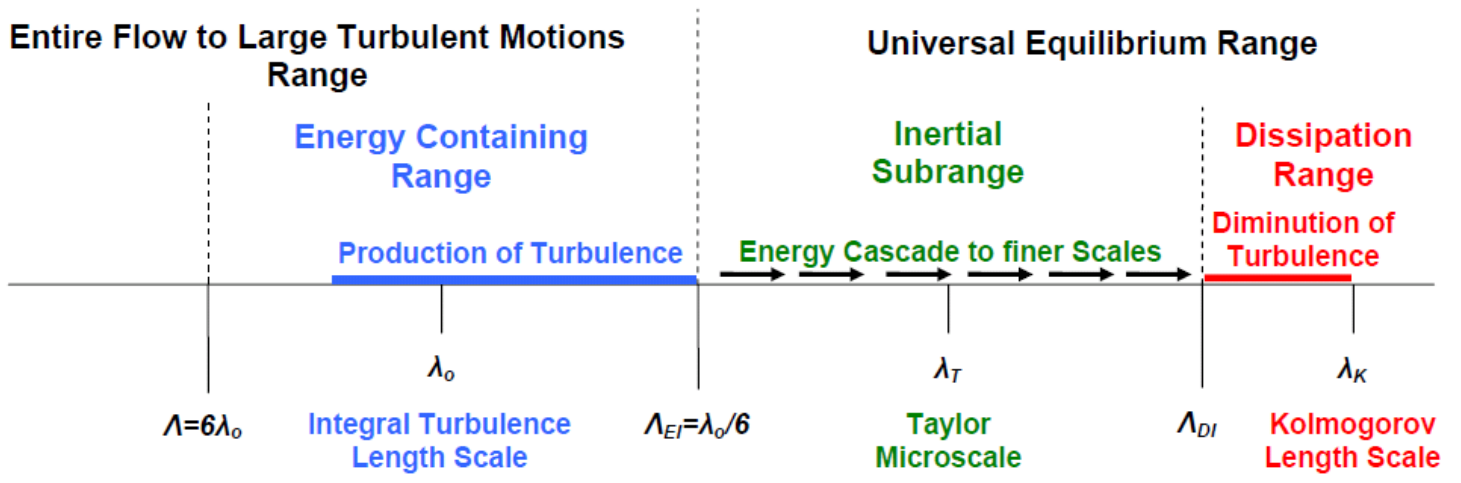
2) Όταν γεννηθεί το τυρβώδες με στροβιλότητα $\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{u}$, όπου $\mathbf{u} = (u, v, w)$, μεταφέρεται και αυτό, όπως και οι άλλες ιδιότητες του ρευστού, στα διάφορα σημεία της ροής. Η μεταφορά μπορεί να γίνει ή από τη μέση ροή ή από τις διακυμάνσεις των παραμέτρων της ροής. Η φάση αυτή είναι γνωστή σαν **φάση μεταφοράς του τυρβώδους**.

Δ.7.7. Τυρβώδης Διάχυση

Φιλοσοφία τυρβώδους κίνησης

3) Το τυρβώδες χαρακτηρίζεται από μια **αύξηση της κινητικής ενέργειας**, σε κάθε σημείο της ροής, **λόγω των διακυμάνσεων**. Αυτή η **κινητική ενέργεια τείνει να ελαττωθεί**, με την επίδραση των **δυνάμεων τριβής**. Η φάση αυτή είναι γνωστή σαν **φάση απώλειας της τυρβώδους ενέργειας**. Η έννοια των ρευστών σωματιδίων, αντικαθίσταται εδώ με την έννοια των **στροβιλισμών**, που έχουν μέγεθος και διεύθυνση, που μεταβάλλονται κατά τρόπο τελείως τυχαίο, μέσα στη ροή.

Η παραγωγή, η μεταφορά και η απώλεια του τυρβώδους **δεν γίνεται με στροβιλισμούς του ίδιου μεγέθους**. Η τυρβώδης ενέργεια κατανέμεται από τούς **μεγάλους στροβιλισμούς** (συνεκτικές δομές τύρβης ολοκληρωτικής κλίμακας), υπεύθυνους για την παραγωγή του τυρβώδους, στους (μεσαίας) **αδρανειακής κλίμακας στροβίλους**, υπεύθυνους για τη μεταφορά του τυρβώδους σε μικρότερες κλίμακες Taylor (cascade), μέχρι τις **μικρής κλίμακας δίνες** (κλίμακες Kolmogorov), υπεύθυνες για την απώλεια/απόσβεση του τυρβώδους.



Δ.7.7. Τυρβώδης Διάχυση

Φιλοσοφία τυρβώδους κίνησης

Είναι δύσκολο να ορίσουμε την τυρβώδη κίνηση ενός στροβιλώδους υγρού, όμως οι διακυμάνσεις της ροής μπορούν να ανιχνευθούν από τα ακόλουθα συμπτώματά της: (α) Η μάζα που εισάγεται σε ένα σημείο θα εξαπλωθεί πολύ πιο γρήγορα σε τυρβώδη ροή από ότι στη στρωτή. Ένα «νήμα» βαφής εισάγεται στην κεντρική γραμμή στο ανάντη άκρο ενός σωλήνα. Στη στρωτή ροή το νήμα διανύει μια ευθεία κατά μήκος της κεντρικής γραμμής, αλλά σε στροβιλώδη ροή, η ράβδος διασπάται γρήγορα και απλώνεται κατά μήκος του σωλήνα. (β) Οι ταχύτητες και οι πιέσεις που μετρούνται σε ένα σημείο του ρευστού είναι ασταθείς και διαθέτουν αξιόλογη τυχαία συνιστώσα.

Στρωτή ροή: ταχύτητα σταθερή

Ευσταθής τυρβώδης ροή: τυχαίες εκτροπές πάνω/κάτω από τον σταθερό μέσο

Τυρβώδης ροή: αριθμός Reynolds $Re = uL/v > 2000$

$Re = \text{αδρανειακές δυνάμεις} / \text{δυνάμεις συνεκτικότητας}$

(τριβές)

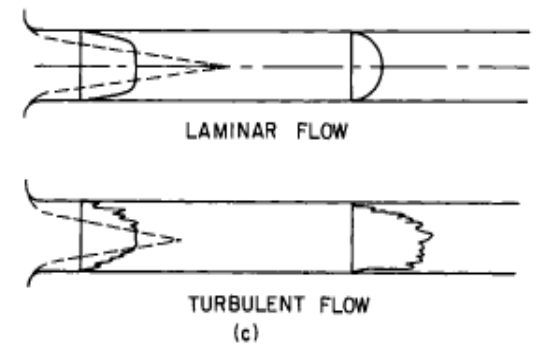
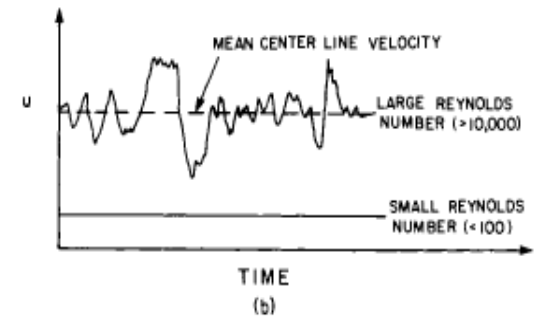
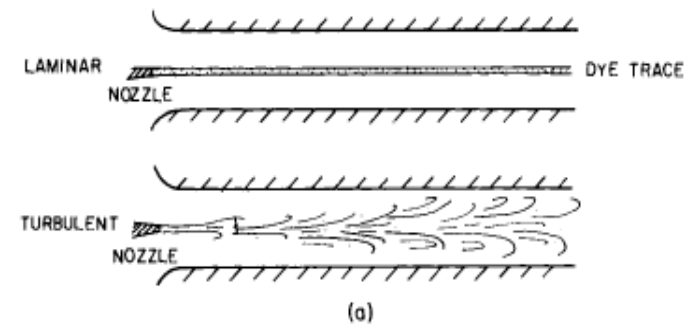


Figure 3.1 (a) Dye introduced at the upstream end of a pipe in laminar and turbulent flow. (b) Record of longitudinal velocity at the center of a pipe at a large and a small Reynolds number. (c) Deformation of a dye surface in laminar and turbulent flow.

Δ.7.7. Τυρβώδης Διάχυση

Εννοιολογική προσέγγιση τυρβώδους διάχυσης (turbulent diffusion)

Με τη διαδικασία αυτή η **τυρβώδης κινητική ενέργεια** μεταφέρεται από τούς **μεγάλους στροβίλους** στους **μικρότερους στροβιλισμούς** και από εκεί στις ακόμα **μικρότερες δίνες**, μέχρι να καταλήξει στη μικροκλίμακα Kolmogorov, όπου γίνεται και η απώλειά της (μετατροπή σε θερμότητα), με ευθύνη του ιξώδους.

Η **τυρβώδης κίνηση** είναι πάντα **τρισδιάστατη**, ακόμα και αν η μέση ροή είναι μονοδιάστατη ή δισδιάστατη. Αυτό οφείλεται στην ίδια τη διαδικασία της ενεργειακής μεταφοράς με τους στροβιλισμούς και συνδέεται με την παρουσία διακυμάνσεων της ταχύτητας, που είναι πάντα 3-D.

Είδαμε ότι δύο είναι οι τύποι μεταφοράς του τυρβώδους:

- η μεταφορά που γίνεται από τη μέση ροή: $\mathbf{u} = (u, v, z)$
- η μεταφορά που γίνεται από τις διακυμάνσεις των παραμέτρων ροής (σε χρόνο και χώρο): $\mathbf{u}' = (u', v', z')$

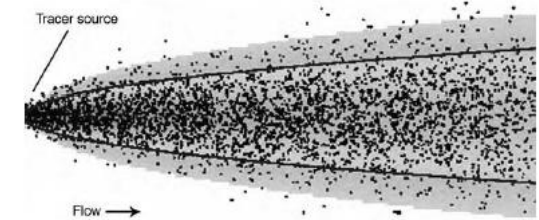
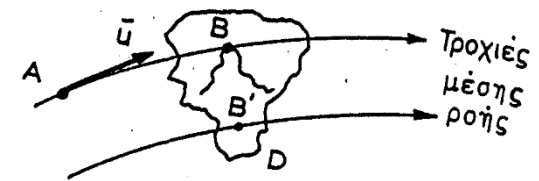


FIGURE 3.1 Turbulent diffusion of tracer particles in uniform flow. (From NOAA, 2005a.)

Από φυσικής πλευράς, μια στοιχειώδης ιδιότητα, για παράδειγμα μία μάζα, που βρίσκεται στο σημείο A του παρακάτω σχήματος, μπορεί να βρεθεί, όχι μόνο στο B, που βρίσκεται στην ίδια τροχιά, λόγω μεταφοράς από τη μέση ροή (για μόνιμη κίνηση), αλλά ακόμα και σε ένα τομέα D γύρω από το B, λόγω μεταφοράς από τις διακυμάνσεις της μέσης ταχύτητας \mathbf{u} . Η τυρβώδης διάχυση είναι ακριβώς το φαινόμενο μεταφοράς, που οφείλεται στις διακυμάνσεις της ταχύτητας \mathbf{u}' .

Δ.7.7. Τυρβώδης Διάχυση

Διαφορές με μοριακή διάχυση

Πιο συγκεκριμένα, η μεταφορά από τις κινήσεις των διακυμάνσεων της ταχύτητας, μπορεί να γίνει από τους μεγάλους ή από τους μικρούς στροβιλισμούς. Από πειραματικά δεδομένα φαίνεται ότι η τυρβώδης διάχυση συνδέεται με τη μεταφορά, από τους μικρούς στροβιλισμούς, των διακυμάνσεων.

Θα δούμε ότι, η τυρβώδης διάχυση ορίζεται σε αναλογία με τη μοριακή. Ο λόγος όμως των τιμών των δύο αυτών διαχύσεων είναι πολύ μεγάλος και κυμαίνεται από $10^2 - 10^4$. Αυτή είναι η αιτία, που η μοριακή διάχυση θεωρείται αμελητέα, στα πρακτικά προβλήματα.

Η διαφορά μεταξύ τυρβώδους και μοριακής διάχυσης, οφείλεται ουσιαστικά στις φυσικές διαφορές των δύο φαινομένων:

- η μοριακή κίνηση γίνεται σε κλίμακα πολύ μικρότερη από τη μικροσκοπική. Έτσι η μοριακή διάχυση αποτελεί μια, ιδιότητα του ρευστού, ανεξάρτητη από την κίνηση του, πράγμα που δεν συμβαίνει με τη τυρβώδη διάχυση.
- η κίνηση δεν είναι της ίδιας δομής στις δύο περιπτώσεις. Τα μόρια, που αφορούν τη μοριακή διάχυση, είναι συγκεκριμένα σωματίδια, των οποίων οι κινήσεις είναι λίγο πολύ ελαστικές, ενώ οι στροβιλισμοί, που αφορούν την τυρβώδη διάχυση, είναι πολύ μεγαλύτερης μάζας και η κίνηση τους έχει άλλο χαρακτήρα.

Για τους λόγους αυτούς, η τυρβώδης διάχυση δεν παραμένει σταθερή, μέσα σε μια ροή, όπως συμβαίνει με τη μοριακή διάχυση, αλλά είναι συνάρτηση των τοπικών χαρακτηριστικών της ροής.

Δ.7.7. Τυρβώδης Διάχυση

Χαρακτηριστικές εξισώσεις

Στην περίπτωση της τυρβώδους ροής, η εξίσωση που αφορά στιγμιαία μεγέθη εξακολουθεί να ισχύει. Εάν αντικαταστήσουμε κάθε μεταβλητή, με το άθροισμα μιας μέσης τιμής και μιας τυρβώδους διακύμανσης, της οποίας η μέση τιμή δεν μεταβάλλεται στο χρόνο, η εξίσωση για τη περίπτωση μόνιμης τυρβώδους ροής, γίνεται:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{c} + c') + (\bar{u}_i + u'_i) \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{c} + c') = D_{\mu} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_i} (\bar{c} + c')$$

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} + \overline{u'_i \frac{\partial c'}{\partial x_i}} = D_{\mu} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x_i \partial x_i}$$

Εάν υποθέσουμε ότι η αναλογία του νόμου του FICK ισχύει και σ' αυτή την περίπτωση, τότε μπορούμε να εκφράσουμε τον όρο $\overline{u'_i c'}$ με τη μορφή:

$$\overline{u'_i c'} = -D_{ij} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} \quad (\text{II. 47})$$

Ο συντελεστής D_{ij} είναι τώρα ένας τανυστής δευτέρης τάξης, δηλαδή ένα μητρώο με εννέα όρους και ονομάζεται συντελεστής τυρβώδους διάχυσης.

Δ.7.7. Τυρβώδης Διάχυση

Χαρακτηριστικές εξισώσεις

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(D_{ii} + D_\mu) \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \right] \quad D_{ii} \gg D_\mu$$

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ii} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \right] \quad (\text{II. 52})$$

που είναι της ίδιας μορφής με την εξίσωση της μοριακής διάχυσης, αλλά βέβαια εδώ ο συντελεστής D_{ii} έχει διαφορετικές τιμές για τις τρεις διευθύνσεις των συντεταγμένων και μπορεί να μεταβάλλεται ανάλογα.

Στη περίπτωση ομογενούς τυρβώδους, δηλαδή τυρβώδους που οι μεταβολές είναι οι ίδιες και προς τις τρεις διευθύνσεις, τότε η εξίσωση (II.52) γίνεται:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} = D_{ii} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x_i \partial x_i} \quad (\text{II. 53})$$

ενώ, εάν το τυρβώδες είναι και ισότροπο, τότε:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} = D_i \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x_i \partial x_i} \quad (\text{II. 54})$$

Δ.7.7. Τυρβώδης Διάχυση

Χαρακτηριστικές εξισώσεις

Αναφέρουμε, χαρακτηριστικά, τις παρακάτω εκφράσεις, που ισχύουν για ομογενές τυρβώδες:

- του PRANDTL
$$D_t = l \sqrt{v'^2} \quad (II. 55)$$

l είναι το μήκος ανάμιξης.

v' είναι η τυρβώδης εγκάρσια διακύμανση.

- του KOLMOGOROFF
$$D_t = \alpha \bar{\epsilon}^{1/3} l^{4/3} \quad (II. 56)$$

$\bar{\epsilon}$ είναι η μέση τιμή των απωλειών ενέργειας, λόγω ιξώδους, στη μονάδα μάζας

α είναι μια σταθερά.

- του RICHARDSON
$$D_t = \beta l^{4/3} \quad (II. 57)$$

είναι γνωστός εμπειρικός νόμος των 4/3.

β είναι μια φαινομενική σταθερά.

- του TAYLOR
$$D_t = \overline{u'^2} \int_0^l R_L(\xi) d\xi \quad (II. 58)$$

u' είναι η τυρβώδης κατά μήκος διακύμανση.

R_L είναι ο συντελεστής συσχέτισης μεταξύ των ταχυτήτων, κατά LA-GRANGE, που ορίζεται από τη γενική σχέση

$$R_L(\xi) = \frac{\overline{p_t p_{t+\xi}}}{\overline{p^2}} \quad (II. 59)$$

$p_t, p_{t+\xi}$ είναι οι τιμές μιας παραμέτρου, π.χ. της ταχύτητας, στους χρόνους t

και $t+\xi$ και $\overline{p^2} = \overline{p_t^2} = \overline{p_{t+\xi}^2}$ (για ομογενή τυρβώδη ροή).

Δ.7.7. Τυρβώδης Διάχυση

Χαρακτηριστικές εξισώσεις

linearly with time. Taylor's analysis has shown that after some start-up time the variance of a spreading cloud of particles in stationary homogeneous turbulent motion grows linearly with time, and suggests that we can define a turbulent mixing coefficient, analogous to the molecular diffusion coefficient, by the relationship

$$\varepsilon_x = \frac{1}{2} \frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} = \langle U^2 \rangle T_x. \quad (3.30a)$$

Equation (3.31) is not the most general form of the turbulent mixing equation, because up to now we have used the simpler forms to stress the concepts. In practical problems the turbulence is often not homogeneous, and it is common to find the diffusion equation written with spatially variable coefficients in the form

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_z \frac{\partial C}{\partial z} \right). \quad (3.37)$$

Δ.7.7. Τυρβώδης Διάχυση

Χαρακτηριστικές εξισώσεις

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla C &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_{xz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \text{similar terms}, \quad (3.39) \end{aligned}$$

where

$$\varepsilon_{xx}(\xi, t) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle X^2(\xi, t) \rangle, \quad \varepsilon_{xy}(\xi, t) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle X(\xi, t) Y(\xi, t) \rangle,$$

and similar terms are in general functions of position and time. We mentioned

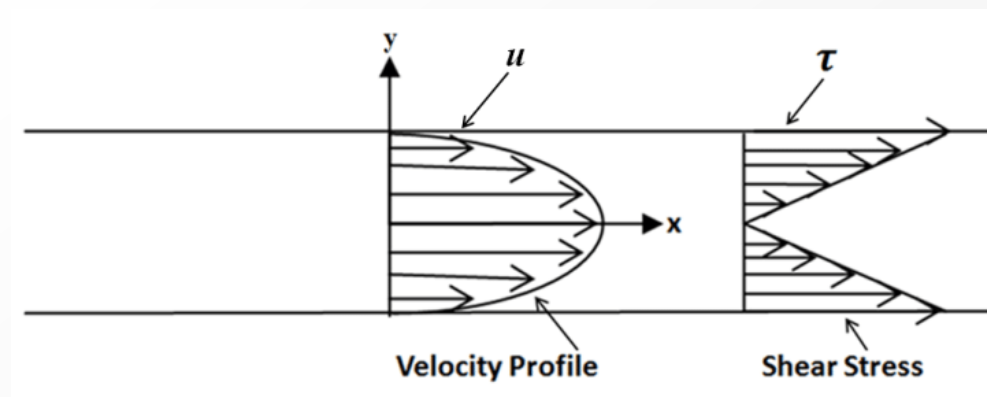
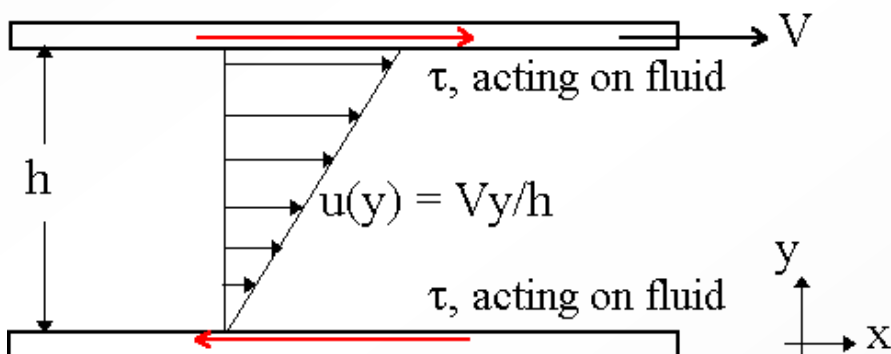
Δ.7.8. Διάτμηση

Γενικά περί διατμητικής ροής

Το 1953 ο Άγγλος μηχανικός ρευστών G. Taylor δημοσίευσε ένα άρθρο που περιγράφει την εξάπλωση των διαλυμένων μολυσματικών ουσιών σε διατμητική ροή σε αγωγό. Ένα χρόνο αργότερα (Taylor, 1954) επέκτεινε την ανάλυσή του σε τυρβώδη ροή. Η ανάλυση Taylor επεκτάθηκε έκτοτε σε ποικιλία περιβαλλοντικών ροών

Σε επόμενες παρουσιάσεις θα δούμε πώς μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να δώσει μια λογικά ακριβή εκτίμηση του ρυθμού εγκάρσιας διασποράς (και ανάμιξης) σε ποτάμια και μερική εκτίμηση της εγκάρσιας διασποράς (και ανάμιξης) στις εκβολές ποταμών. Κοινή σε όλες αυτές τις ροές είναι ότι η εξάπλωση (spreading) των ρυπαντών στην κατεύθυνση της ροής προκαλείται κυρίως από το προφίλ ταχύτητας στην εγκάρσια διατομή.

Οι ροές με **κλίσεις στο προφίλ ταχύτητας** αναφέρονται συχνά ως **ροές διάτμησης** και ο μηχανισμός που αναλύεται από το Taylor είναι συχνά γνωστός ως **διάτμηση (shear)**.

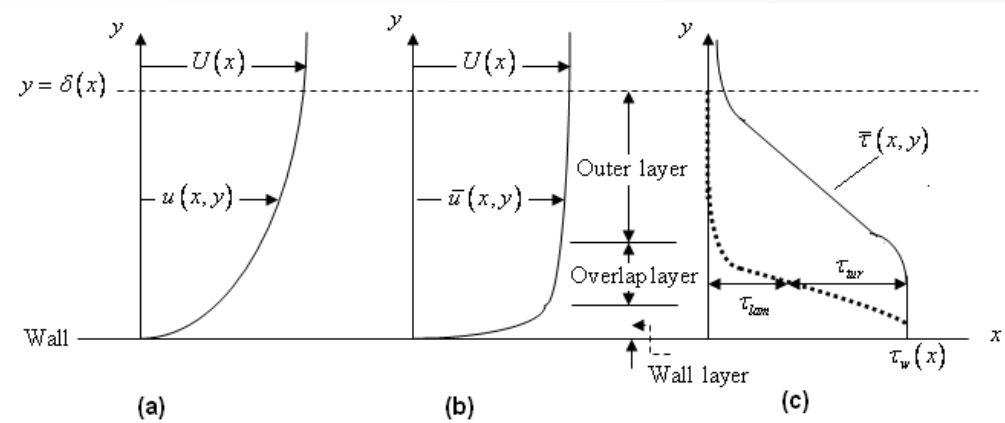
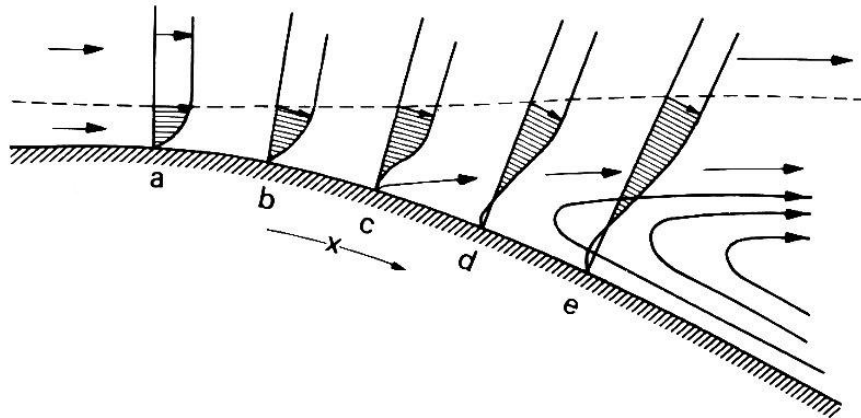


Δ.7.8. Διάτμηση

Γενικά περί διατμητικής ροής

Η ταχύτητα κάθε μορίου είναι ουσιαστικά αυτή της γραμμής ροής στην οποία βρίσκεται, συνάρτηση της θέσης της εγκάρσιας τομής. Λόγω της μοριακής διάχυσης κάθε μόριο κινείται τυχαία μπρος/πίσω στην εγκάρσια διεύθυνση κατά μήκος της εγκάρσιας διατομής και μετά από αρκετό καιρό μπορούμε να πούμε ότι η θέση του είναι ανεξάρτητη από την τοποθεσία στην οποία ξεκίνησε. Επομένως η ταχύτητά του είναι ανεξάρτητη της αρχικής ταχύτητας.

Έτσι μπορούμε να φανταστούμε ότι η κίνηση ενός μεμονωμένου μορίου είναι το άθροισμα μιας σειράς ανεξάρτητων βημάτων τυχαίου μήκους. Ως εκ τούτου θα πρέπει να περιμένουμε περιγραφή της εξάπλωσης των σωματιδίων κατά μήκος του άξονα του σωλήνα, όπως στη μοριακή διάχυση, όμως με πολύ διαφορετικά χωρικά και χρονικά βήματα από αυτά της μοριακής διάχυσης. Οπότε ορίζεται **συντελεστής διασποράς** ως νέου τύπου «συντελεστής διάχυσης» (διεργασία διάχυσης λόγω όμως της ροής διάτμησης).



Δ.7.8. Διάτμηση

Στρωτή διατμητική ροή

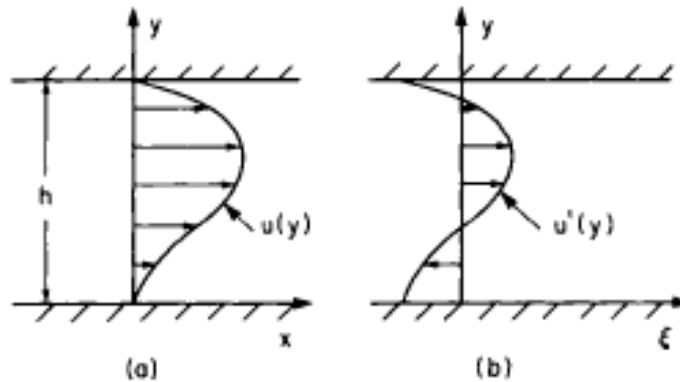


Figure 4.2 (a) An example velocity distribution. (b) The same velocity distribution as in (a) but transformed to a coordinate system moving at the mean velocity.

Έχουμε πια 2-D διακυμάνσεις στον χώρο (όχι στον χρόνο) και μέσες στον χώρο τιμές παραμέτρων

As before, the deviation from the mean is defined by $C'(y) = C(y) - \bar{C}$. Since the only flow is in the x direction, the diffusion equation is

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{C} + C') + (\bar{u} + u') \frac{\partial}{\partial x} (\bar{C} + C') = D \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} (\bar{C} + C') + \frac{\partial^2 C'}{\partial y^2} \right]. \quad (4.5)$$

Δ.7.8. Διάτμηση

Τυρβώδης διατμητική ροή

K is found by substituting (4.41) and (4.43) into (4.36), although the integrations are not simple. The first two integrals yield

$$C' = \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \frac{d}{\kappa^2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \left(\frac{d-y}{d} \right)^n - 0.648 \right) \quad (4.44)$$

and the third gives

$$K = \frac{0.404}{\kappa^3} du^*. \quad (4.45)$$

Elder took $\kappa = 0.41$ to give the well known result

$$K = 5.93 du^*. \quad (4.46)$$

$$K = \frac{h^2 \overline{u'^2}}{E} I,$$

Δ.7.8. Διάτμηση

Ασταθής διατμητική ροή

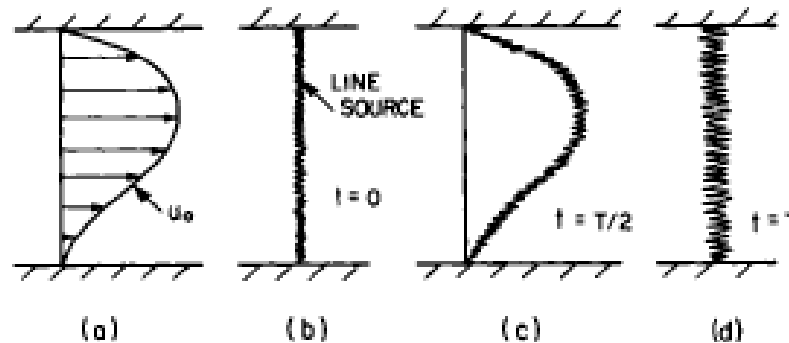


Figure 4.6 The shear effect in oscillating flow for the case $T \ll T_c$. (a) A hypothetical velocity distribution $u = u_0 \sin(2\pi t/T)$. (b) A line source introduced at $t = 0$. (c) The distribution at $t = T/2$. (d) The distribution at $t = T$.

linear velocity profile of Section 4.1.3 with a sinusoidal oscillation. The velocity profile is given by

$$u = U(y/h) \sin(2\pi t/T), \quad (4.49)$$

in which T is the period of oscillation.

$$C' = \frac{2Uh^2}{\pi^3 D} \frac{T}{T_c} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n-1)^2} \sin(2n-1)\pi \frac{y}{h} \\ \times \left[\left(\frac{\pi}{2} (2n-1)^2 \frac{T}{T_c} \right)^2 + 1 \right]^{-1/2} \sin\left(\frac{2\pi t}{T} + \theta_{2n-1} \right), \quad (4.53)$$

where

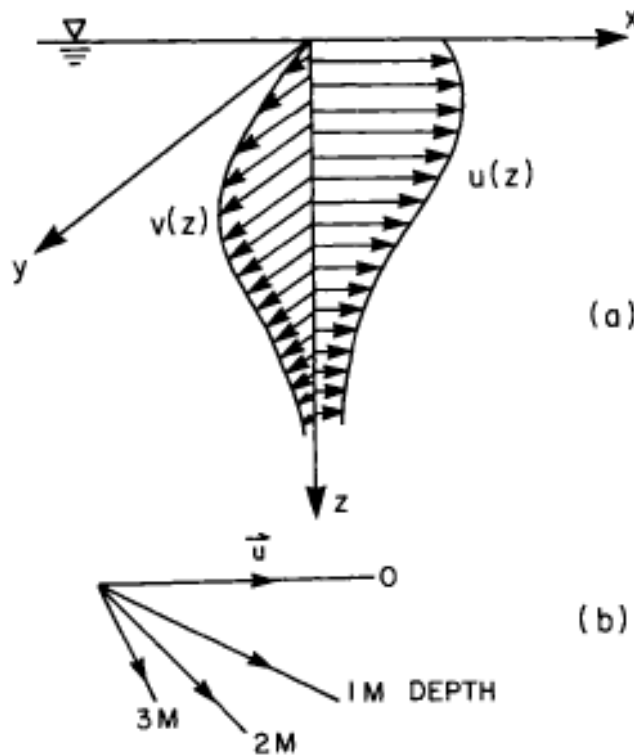
$$\theta_{2n-1} = \sin^{-1} \left(- \left[\frac{1}{2} \pi (2n-1)^2 T/T_c \right]^2 + 1 \right)^{-1/2}. \quad (4.54)$$

Δ.7.8. Διάτμηση – Διασπορά

Διασπορά σε (απεριόριστη) 2-D διατμητική ροή

$$u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + v' \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial z} \varepsilon \frac{\partial C'}{\partial z} \quad (4.61)$$

$$\frac{\partial C'}{\partial z} = 0 \quad \text{at } z = 0, h.$$



$$K = \frac{d^2}{\varepsilon} \begin{pmatrix} U_0^2/120 & 5U_0 V_0/192 \\ 5U_0 V_0/192 & V_0^2/12 \end{pmatrix}.$$

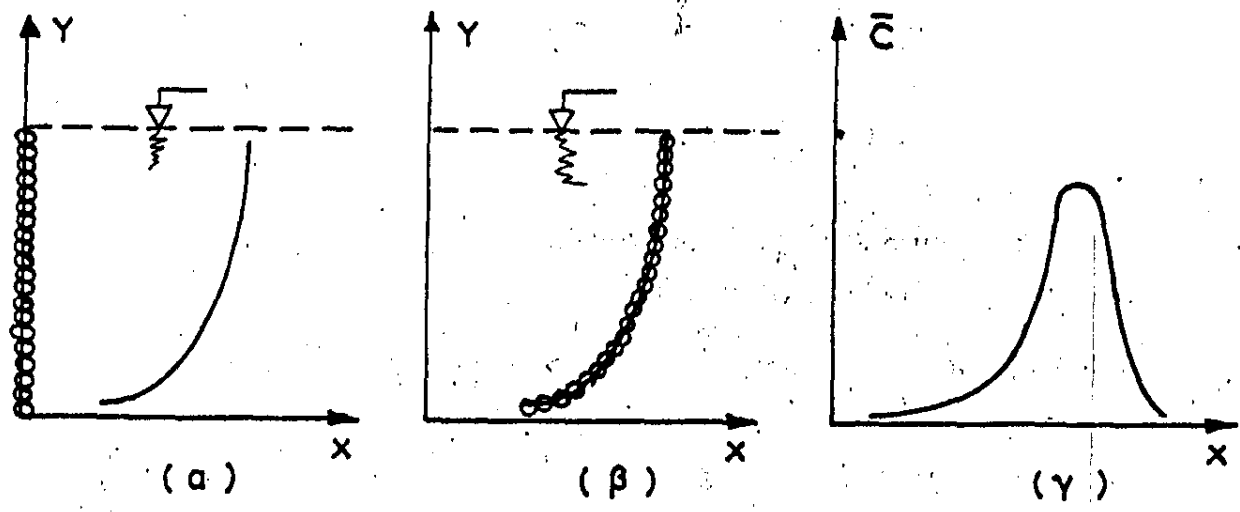
Figure 4.8 A typical skewed shear flow near the surface of a lake. (a) Velocity profile. (b)

Hodograph. [After Csanady (1966).]

Δ.7.9. Τυρβώδης Διασπορά

Διαφορές από την έννοια της διάχυσης

Η έννοια της **τυρβώδους διασποράς (turbulent dispersion)** βρίσκει ευρύτετες εφαρμογές στις ροές ποταμών και παρακτίων περιοχών. Η **βασική διαφορά** της τυρβώδους διασποράς, από τη μοριακή και τυρβώδη διάχυση, έγκειται στις κλίμακες, των μορίων και των στροβιλισμών. Είναι γνωστό ότι η μοριακή διάχυση βασίζεται στη μικροσκοπική κίνηση των μορίων, ενώ η τυρβώδης διάχυση στην επιπλέον κίνηση (δίνες και στροβίλους) λόγω τυρβώδους ροής, ανάλογα με τις μέσες και διακυμαινόμενες χρονικές τιμές, σε κάθε σημείο της ροής. Η **τυρβώδης διασπορά** προχωράει σε ακόμη μεγαλύτερη κλίμακα και βασίζεται στις **(χωρικά) μέσες τιμές των ταχυτήτων σε μια εγκάρσια διατομή**. Στη τυρβώδη διάχυση, δηλαδή, προστίθεται τώρα και η επίδραση της κατακόρυφης κατανομής ταχύτητας στην εγκάρσια διατομή. Η έννοια της τυρβώδους διασποράς μπορεί να γίνει κατανοητή και με ένα μικρό παράδειγμα:



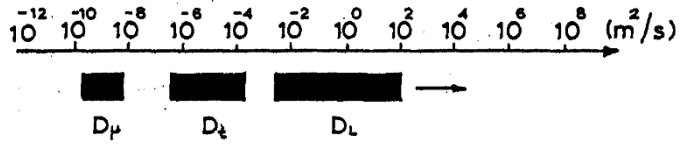
Σχ.(Π.6). Διασπορά σε φυσικό ρεύμα.

Δ.7.9. Τυρβώδης Διασπορά

Διαφορές από την έννοια της διάχυσης

Για την προηγούμενη δισδιάστατη ροή σε φυσικό υδατόρευμα, όπου φαίνεται μια χαρακτηριστική κατανομή ταχύτητας σε μια εγκάρσια διατομή, κατά μήκος του φυσικού ρεύματος, η αρχική κατανομή των σωματιδίων ενός δείκτη (μιας χρωστικής ουσίας), θεωρείται ότι είναι ομοιόμορφη, πάνω σε μια κατακόρυφο (τμήμα α). Στην αρχή, η κίνηση είναι καθαρά κίνηση μεταφοράς των σωματιδίων της ουσίας και η κατανομή τους παίρνει τη μορφή της κατανομής της ταχύτητας (τμήμα β). Η κατανομή αυτή των σωματιδίων δημιουργεί, τότε, διαφορές συγκεντρώσεων πάνω στη κατακόρυφο, που με τη σειρά τους ελαττώνονται με την επίδραση της κατακόρυφης διάχυσης. Όσο προχωράμε μέσα στο χρόνο, τα σωματίδια μεταφέρονται με ταχύτητες που πλησιάζουν σχεδόν αυτές τις ελεύθερης επιφάνειας, ενώ ταυτόχρονα μια λεπτή μακριά ουρά σωματιδίων τεντώνεται κατά μήκος του βυθού (τμήμα γ).

Υπάρχει πιθανότητα η κατακόρυφη διάχυση να δημιουργήσει, μετά από αρκετό χρόνο, μια κανονική, κατά μήκος κατανομή των συγκεντρώσεων, τύπου Gauss. Ο Taylor παρατήρησε ότι, πολύ μακριά από την πηγή των σωματιδίων, η μεταβολή της ταχύτητας εξισορροπεί την ελάττωση λόγω ανάμιξης στην εγκάρσια διατομή. Έχουμε δηλαδή μια κατανομή της συγκέντρωσης σχεδόν μόνιμη, η οποία αντιδρά με την κατακόρυφη κατανομή ταχύτητας, για να παράγει μια φαινόμενη διάχυση, τύπου Fick, κατά μήκος του άξονα του φυσικού ρεύματος: **φαινόμενη διάχυση ή μεταφερόμενη διασπορά ή απλά διασπορά**, η οποία είναι ο **συνδυασμός της τυρβώδους διάχυσης και της επίδρασης τη κατακόρυφης κατανομής ταχύτητας**. Συντελεστής κατά μήκος διασποράς >> Συντελεστή κατά μήκος τυρβώδους διάχυσης >> Συντελεστή μοριακής διάχυσης.



Σχ. (Π.7). Χαρακτηριστικές τιμές των συντελεστών, μοριακής και τυρβώδους διάχυσης και συντελεστή διασποράς.

Δ.7.9. Τυρβώδης Διασπορά

Χαρακτηριστικές εξισώσεις

Εάν πάρουμε τώρα τις μέσες τιμές των μεταβλητών, σε μια εγκάρσια διατομή του φυσικού ρεύματος, με τις τοπικές διακυμάνσεις τους, αποδεικνύεται ότι, όταν μοντελοποιήσουμε τούς επιπλέον όρους, σε αναλογία με το νόμο του Fick, όπως έγινε στη τυρβώδη διάχυση, καταλήγουμε σε μια γενική μορφή εξίσωσης, όμοια εκείνης για την τυρβώδη και μοριακή διάχυση, όπου ο συντελεστής τυρβώδους ή μοριακής διάχυσης αντικαθίσταται με το συντελεστή διασποράς D_L . Η μονοδιάστατη εξίσωση διασποράς έχει τη μορφή:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} \quad (\text{II. 60})$$

\bar{c} είναι οι μέσες τιμές στην εγκάρσια διατομή του φυσικού ρεύματος, συνάρτηση του x .

Η λύση της εξίσωσης (II.60), είναι της ίδιας μορφής με τις λύσεις των εξισώσεων της μοριακής και τυρβώδους διάχυσης, ενώ η δυσκολία μετατοπίζεται τώρα στην έκφραση του συντελεστή διασποράς, D_L , σε συνάρτηση με τις χαρακτηριστικές παραμέτρους της ροής.

Δ.7.9. Τυρβώδης Διασπορά

Χαρακτηριστικές τιμές Συντελεστή Διασποράς

Οι σημαντικώτερες εκφράσεις, για τη πρόβλεψη του συντελεστή διασποράς, σε συνάρτηση με τις χαρακτηριστικές παραμέτρους της ροής, είναι:

- ο TAYLOR (1954), για μεγάλους κυλινδρικούς αγωγούς, καταλήγει στην έκφραση:

$$D_L = 10,1 R_H v_0 \quad (\text{II. 61})$$

- ο ELDER (1959), για αβαθείς και μεγάλο πλάτους αγωγούς, με την υποθεση της λογαριθμικής κατανομής της ταχύτητας, βρίσκει:

$$D_L = 5,93 \bar{H} v_0 \quad (\text{II. 62})$$

\bar{H} είναι το μέσο βάθος ροής.

- ο KRENKEL (1960), για διδιάστατα κανάλια δίνει:

$$D_L = 6,4 \bar{H}^{1,24} \bar{v}^{0,3} \quad (\text{II. 63})$$

- ο FISCHER, για φυσικά ρεύματα, βρίσκει τιμές:

$$D_L = 50 R_H v_0 - 700 R_H v_0 \quad (\text{II. 64})$$

πολύ μεγαλύτερες εκείνων του εργαστηρίου.

Δ.7.9. Τυρβώδης Διασπορά

Χαρακτηριστικές τιμές Συντελεστή Διασποράς

Οι μεγάλες αυτές διαφορές αποδίδονται (Fischer et al., 1979) σε πολλούς παράγοντες:

- η τρισδιάστατη επίδραση της ροής
- η κυριαρχία της εγκάρσιας μεταβολής της ταχύτητας, για φυσικά ρεύματα μεγάλου πλάτους
- η παρουσία νεκρών ζωνών
- η μη ομοιομορφία, λόγω μεταβλητού βάθους ή άλλων ασυνεχειών, του φυσικού ρεύματος
- η επίδραση άλλων κλιμάκων χώρου ή χρόνου
- οι σχετικές επιδράσεις των γεωμετρικών

χαρακτηριστικών του ρεύματος

π.χ. λόγος πλάτος/βάθος

Ο ίδιος ο FISCHER, βασιζόμενος σε μια θεωρία του EINSTEIN, δίνει μια πειραματική στατιστική μέθοδο υπολογισμού του D_L , όταν είναι γνωστές οι συναρτήσεις συγκέντρωσης-χρόνου, για δυο πειραματικούς σταθμούς, κατά μήκος του φυσικού ρεύματος.

Η έκφραση υπολογισμού του συντελεστή διασποράς D_L , είναι:

$$D_L = \frac{\bar{u}^2}{2} \frac{\sigma_{t_2}^2 - \sigma_{t_1}^2}{t_2 - t_1} \quad (\text{II. 65})$$

$\sigma_{t_1}^2$, $\sigma_{t_2}^2$ είναι τα τετράγωνα των τυπικών αποκλίσεων των τιμών των καμπύλων συγκέντρωσης-χρόνου, για τους δύο πειραματικούς σταθμούς, αντί και κατάντι.

Γενικά, το τετράγωνο της τυπικής απόκλισης, δίνεται από τη σχέση:

$$\sigma_{t_i}^2 = \frac{\sum_i c_i t_i^2}{\sum_i c_i} - \left[\frac{\sum_i c_i t_i}{\sum_i c_i} \right]^2 \quad (\text{II. 66})$$

t_1 , t_2 είναι οι μέσοι χρόνοι περάσματος της συγκέντρωσης του δείκτη από κάθε σταθμό, που θεωρούνται ίσοι με το χρόνο που περνά το μέγιστο της συγκέντρωσης.

Ρύθμιση Μοντέλων Ποιότητας Νερού

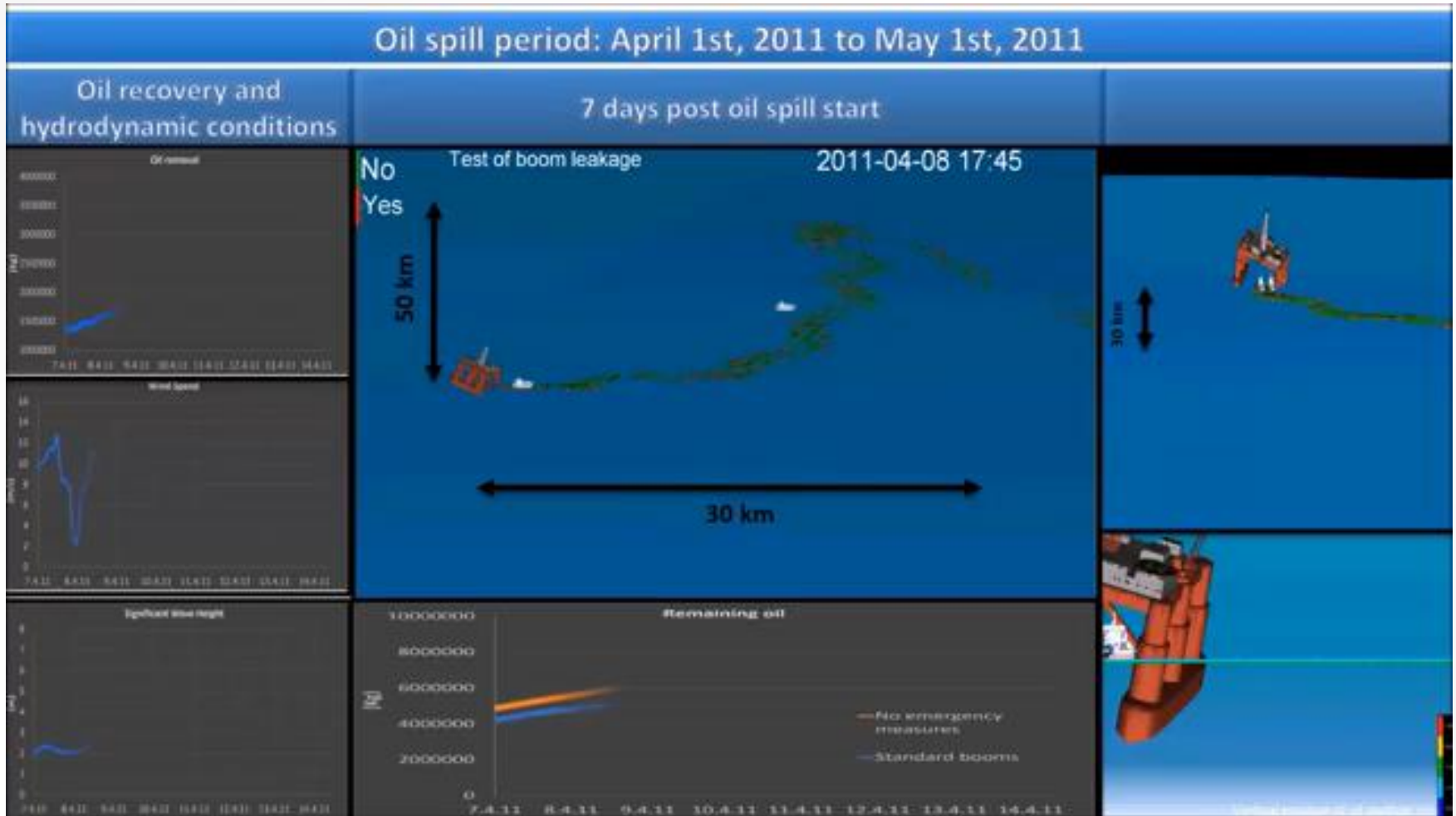
Είναι φανερό η δυσκολία εκτίμησης και προσδιορισμού του συντελεστή διασποράς D_L , ανάλογα με την ιδιαιτερότητα του κάθε φυσικού ρεύματος ή υδάτινου σώματος

Αποτελεί ουσιαστικά παράμετρο ρύθμισης (tuning factor) των μαθηματικών ομοιωμάτων

Δ.7.9. Τυρβώδης Διασπορά

Τυπική απεικόνιση Τυρβώδους Διασποράς

Από προσομοιώσεις διάχυσης διασποράς πλουμίου/σωματιδίων πετρελαιοκηλίδας



Δ.7.10. Συμπαράσυρση

Εξήγηση φαινομένου

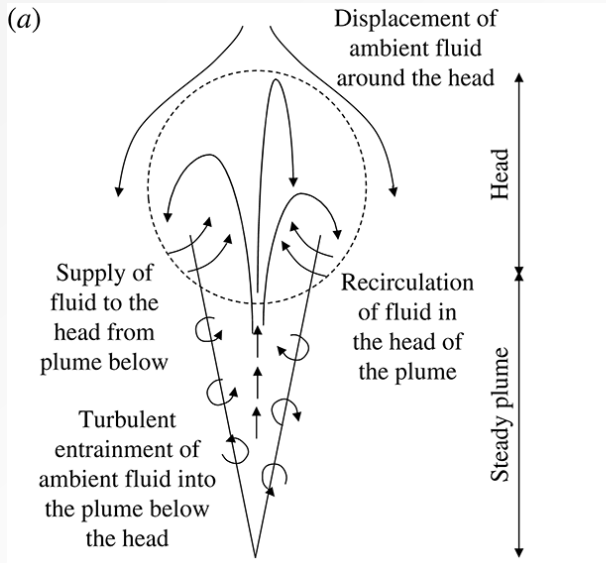
Η **συμπαράσυρση (entrainment)** είναι ένα φαινόμενο των ρευστών κατά το οποίο μια συνήθως τυρβώδης ροή συλλαμβάνει μια μη (ή όχι τόσο έντονα) τυρβώδη ροή, π.χ. η «σύλληψη» μιας ξηρής ροής ανέμου από ροή υψηλής περιεκτικότητας σε υγρασία (περίπτωση των τροπικών κυκλώνων). Η **απόσυρση (detrainment)** είναι το αντίθετο αποτέλεσμα ανταλλαγής ροών, π.χ. όταν ο αέρας από ένα συμπαγές σύννεφο, συνήθως στην κορυφή του, εγχέεται στο ξηρότερο περιβάλλον.

Η **συμπαράσυρση** είναι η **μεταφορά υγρού** σε μια **διεπιφάνεια επαφής μεταξύ δύο υδάτινων σωμάτων** από **τυρβώδη ροή** που προκαλείται **λόγω διάτμησης**. Εφαρμόζεται σε ροή **τυρβωδών φλεβών** και **πλουμίων** και αφορά σε υπόθεση εξαναγκασμένης τοπικά στροβιλώδους ροής ανάμεσα σε μάζες υγρών με έντονη διαφορά πυκνοτήτων και υπό την ταυτόχρονη επίδραση έντονης διάτμησης.

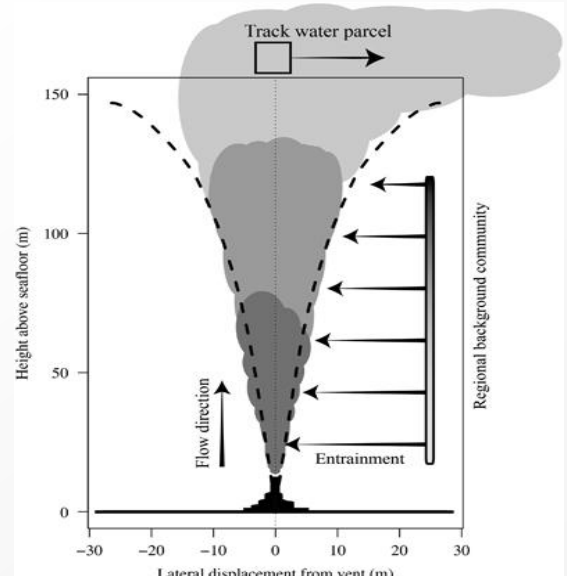
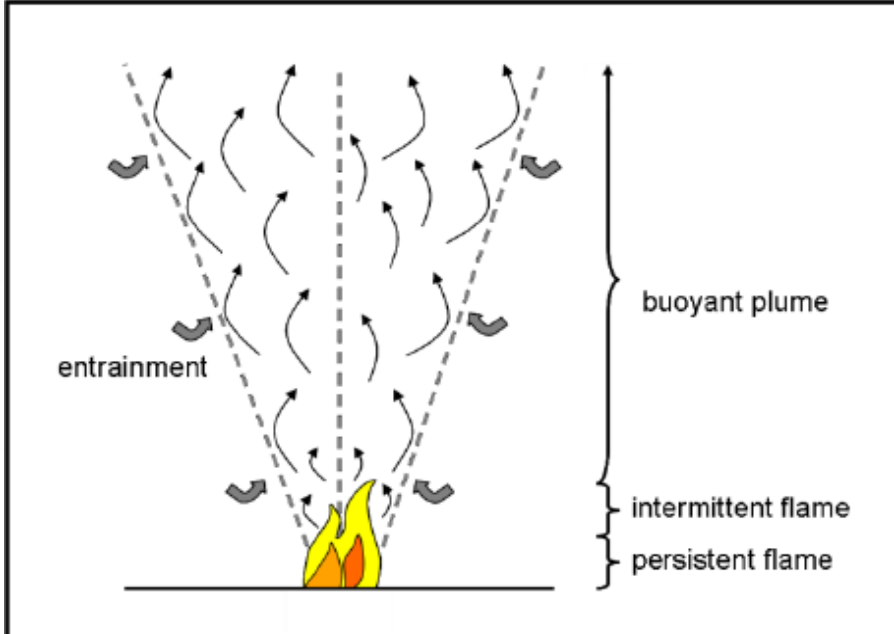
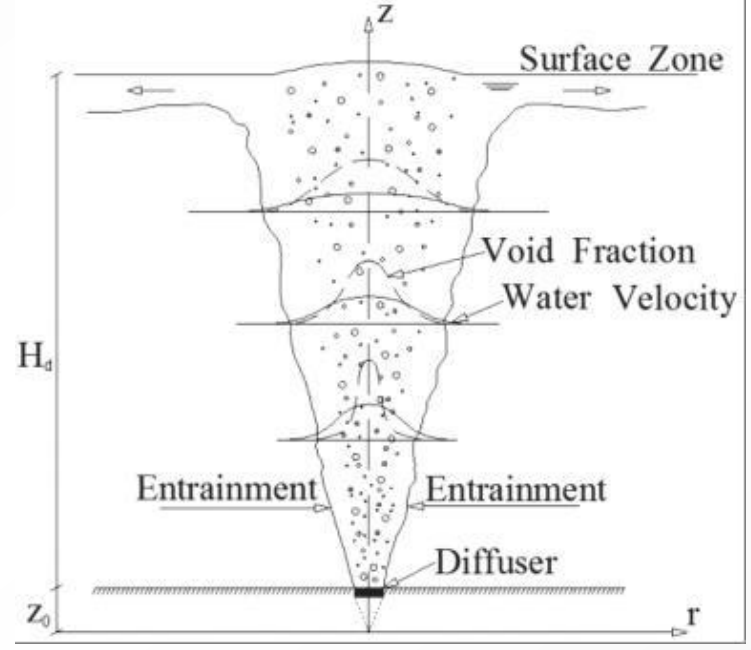
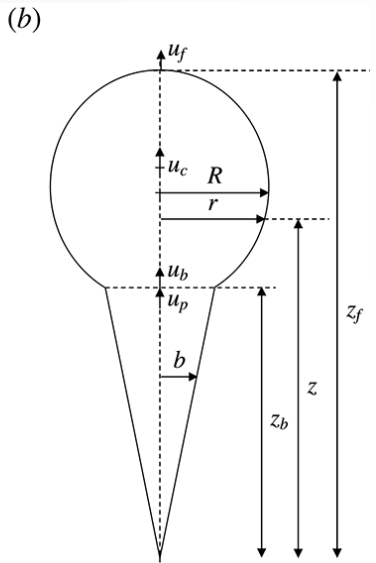
Αποτελεί κοινό μοντέλο «κλεισίματος της τύρβης» στην περιβαλλοντική και τη γεωφυσική ρευστομηχανική. Η συμπαράσυρση είναι σημαντική σε στροβιλώδεις πίδακες, φλέβες, πλούμια και ρεύματα βαρύτητας και αποτελεί θέμα της τρέχουσας έρευνας.

Δ.7.10. Συμπαράσυση

Τυπικές εικόνες συμπαράσυσης



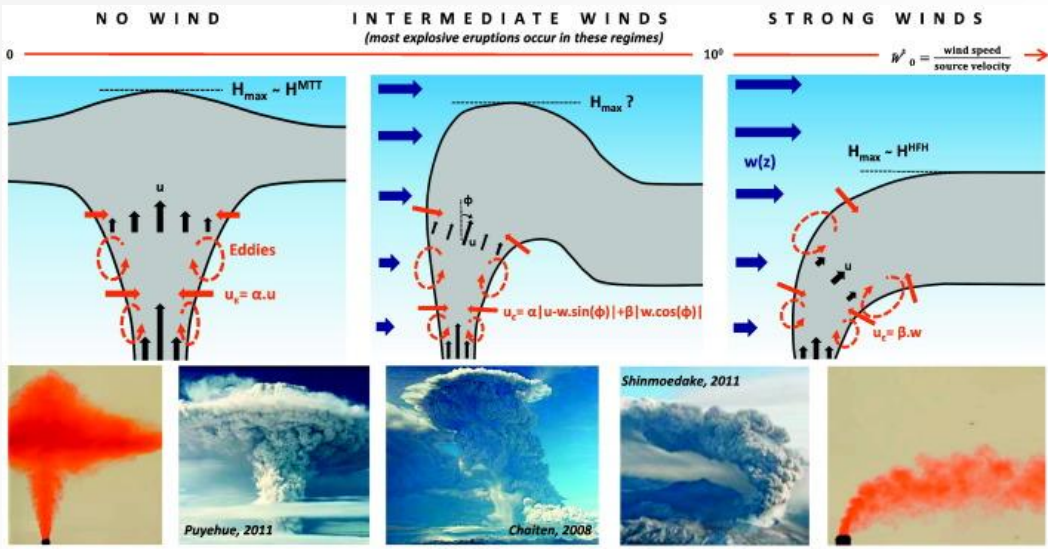
Θεωρητικές απεικονίσεις και σχήματα



Δ.7.10. Συμπαράσυρση

Τυπικές εικόνες συμπαράσυρσης

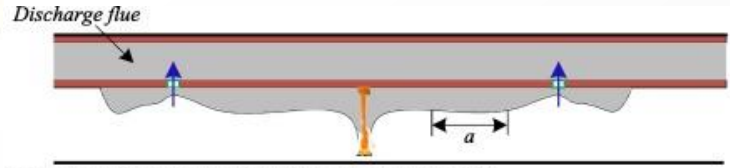
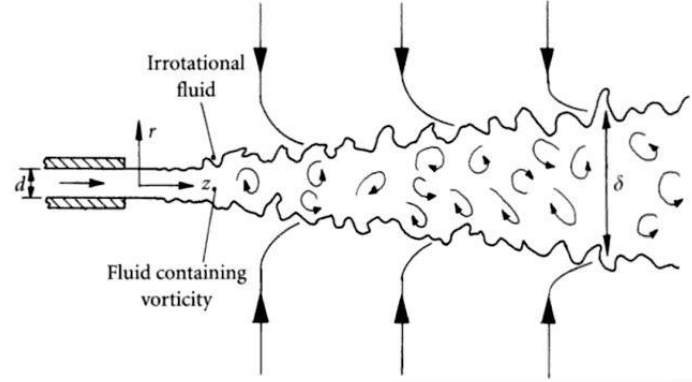
Πρακτικές απεικονίσεις και σχήματα



Morton, Taylor and Turner scaling
 $\alpha = 0.05-0.16$ from lab and numerical experiments

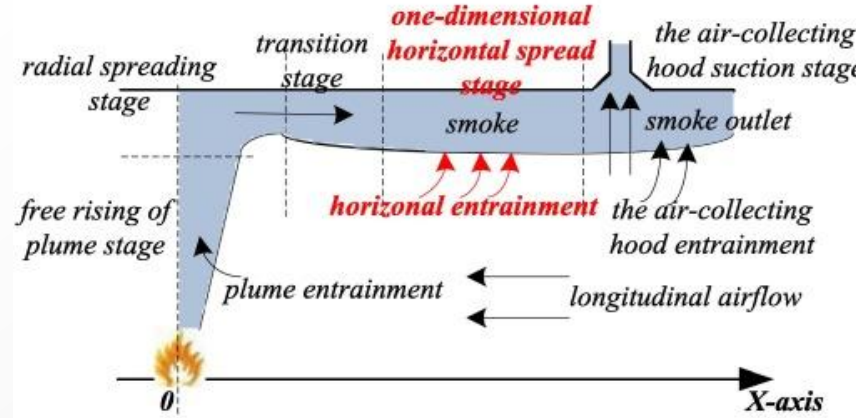
Best scaling?
 lab experimental studies cover sparse regimes

Hewett, Fay and Hoult scaling
 $\beta = 0.1-1$ from lab and numerical experiments



Section a is the one-dimensional horizontal spread stage

(a) Sketch of tunnel central exhaust

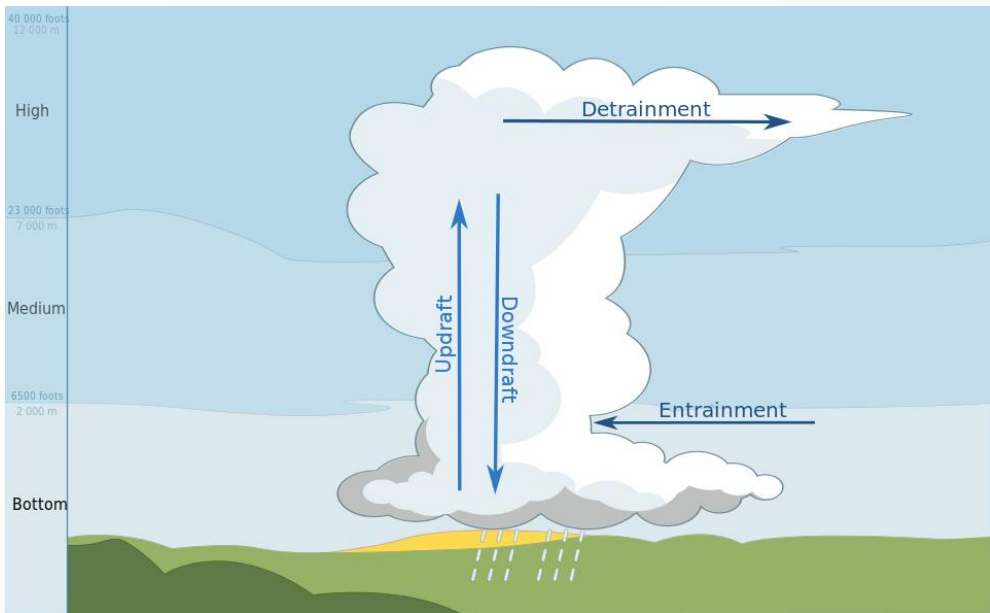
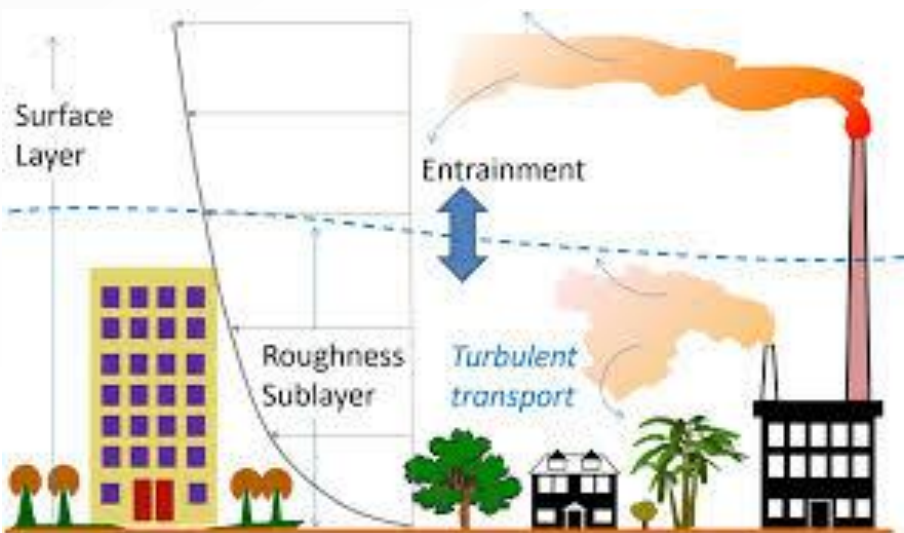
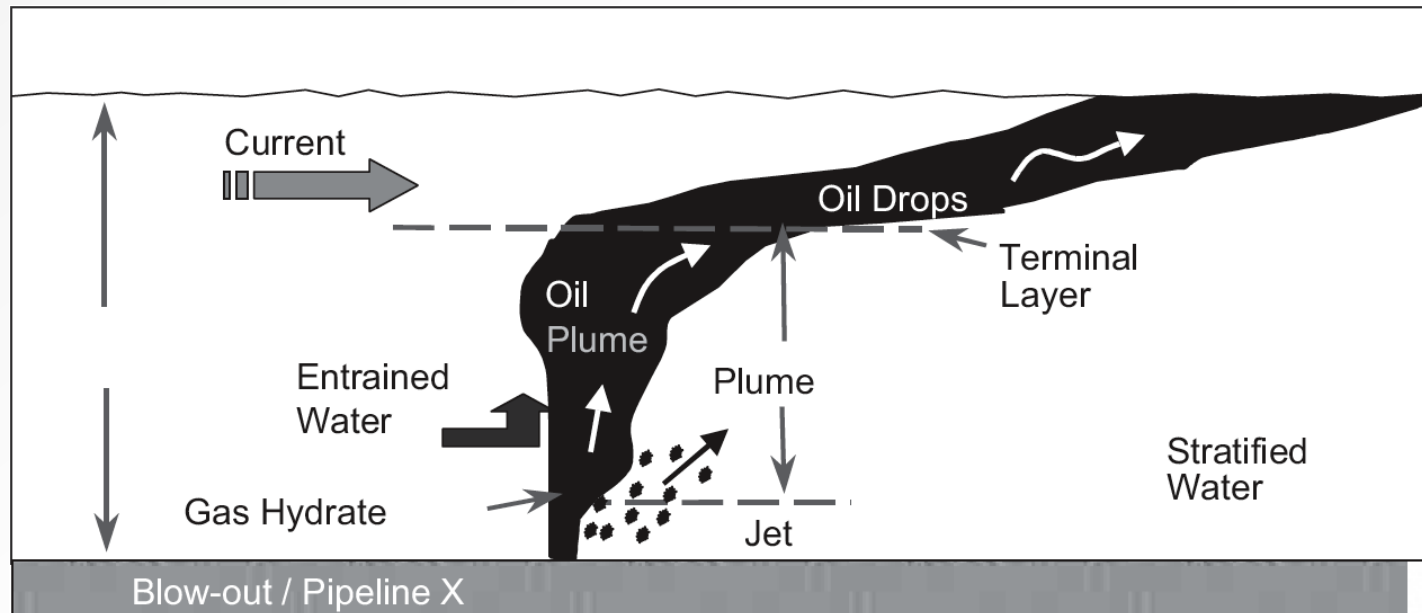


(b) Sketch of the process of smoke spreading near fire zone

Δ.7.10. Συμπαράσυση

Τυπικές εικόνες συμπαράσυσης

Περιβαλλοντικές διεργασίες



Δ.7.11. Εξίσωση Μοντέλου Ποιότητας H₂O

Μοντέλο ποιότητας νερού

1. Διατήρηση της μάζας
2. Νόμοι που διέπουν τις χημικές, βιοχημικές και βιολογικές διεργασίες
3. Οριακές συνθήκες και αρχικές συνθήκες

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(uC)}{\partial x} + \frac{\partial(vC)}{\partial y} + \frac{\partial(wC)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + S_c \quad (5.1.4)$$

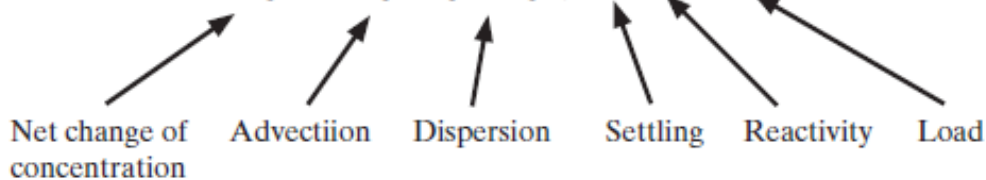
where C = concentration of a water quality state variable; u, v, w = velocity components in the $x, y,$ and z directions, respectively; K_x, K_y, K_z = turbulent diffusivities in the $x, y,$ and z directions, respectively; and S_c = internal and external sources and sinks per unit volume.

Οι καθαρές μεταβολές των συγκεντρώσεων των ρύπων στο νερό συνεπάγονται 5 διαδικασίες:

1. Ο όρος **μεταγωγής** αντιστοιχεί στις εισροές και τις εκροές μάζας από υδάτινο ρεύμα και προσδιορίζει την κίνηση του ρύπου μαζί με το νερό προς τα κατάντη.
2. Ο όρος **διασποράς** περιγράφει την εξάπλωση του ρύπου που συμβαίνει λόγω τυρβώδους ανάμιξης και μοριακής διάχυσης.
3. Ο όρος **καθίζησης** αντιπροσωπεύει την καθίζηση των σωματιδίων και την επαναιώρηση από τον πυθμένα.
4. Ο όρος **αντίδρασης** αναφέρεται σε χημικές-βιολογικές διεργασίες στη στήλη του νερού.
5. Ο όρος **πηγής φορτίου** υποδηλώνει εξωτερικές πηγές ρύπανσης

Για 1-D περίπτωση

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + S + R + Q \quad (2.1.33)$$



where C = reactant concentration, t = time, x = distance, U = advection velocity in x direction, D = mixing and dispersion coefficient, S = sources and sinks due to settling and resuspension, R = reactivity of chemical and biological processes, and Q = external loadings to the aquatic system from point and non-point sources.

Δ.7.12. Μεταφορά και ανάμιξη διαλυμάτων

Εισαγωγή σε βασικές έννοιες

Κύριες φυσικές διεργασίες: **μεταφορά** και **ανάμιξη διαλυμάτων** και **αιωρημάτων** σε θαλάσσιο αποδέκτη

Ο διαχωρισμός **διαλύματος** και **αιωρήματος** γίνεται σε σχέση με τη φύση του υλικού που εισάγεται στο θαλάσσιο περιβάλλον: στην πρώτη περίπτωση πρόκειται για **ρευστό** και στη δεύτερη για **στερεό**.

Παραδείγματα περιπτώσεων **μεταφοράς** και **ανάμιξης** είναι:

- σημειακή/διάχυτη εισροή ανεπεξέργαστων ρύπων στο θαλάσσιο περιβάλλον από ρέματα, ανοιχτούς (ροή ελεύθερη με επιφάνεια) και κλειστούς (ροή υπό πίεση) αγωγούς (διάλυμα)
- διάθεση αστικών/βιομηχανικών επεξεργασμένων (από ΕΕΛ) ή ανεπεξέργαστων λυμάτων με εκροή από υποβρύχιους αγωγούς και διαχυτήρες (διάλυμα)
- διαρροή και εξάπλωση πετρελαιοκηλίδας (διάλυμα)
- εκροή διαλυμένα αέρια στο θαλασσινό νερό (διάλυμα)
- μεταφορά φυσικών παραμέτρων, όπως αλατότητα και θερμοκρασία νερού (διάλυμα)
- ανάμιξη μαζών νερού διαφορετικών θερμοαλατικών χαρακτηριστικών (διάλυμα)
- εισροή φερτών υλών στο θαλάσσιο περιβάλλον από ποτάμια, διάθεση προϊόντων βυθοκόρησης, διάβρωση πυθμένα κ.α. (αιώρημα)
- εξέλιξη κοινοτήτων μικροοργανισμών με μικρή η καθόλου κινητικότητα (φυτοπλαγκτόν, ζωοπλαγκτόν, βακτήρια) σε σχέση με τους πληθυσμούς τους (αιώρημα)

Δ.7.12. Μεταφορά και ανάμιξη διαλυμάτων

Μεταφορά, διάχυση και διασπορά διαλυμάτων

Δύο είναι οι κύριοι μηχανισμοί που καθορίζουν την κίνηση και την ανάμιξη των ουσιών στο θαλάσσιο περιβάλλον:

– Οριζόντια μεταφορά ή μεταγωγή (Advection)

εκφράζει την κίνηση του υλικού λόγω της τοπικής ταχύτητας ροής του περιβάλλοντος και ουσιαστικά πρόκειται για την παθητική μετατόπιση του αιωρήματος ή του διαλύματος.

– Τυρβώδης Διασπορά (Turbulent Dispersion)

είναι η βασική διαδικασία ανάμιξης/διάλυσης και οφείλεται στον συνδυασμό της μοριακής διάχυσης με την τυρβώδη διάχυση, τη συναγωγή και τη μεταφορά και υποχρεώνει τις ουσίες σε κίνηση, προς τυχαίες κατευθύνσεις σε σχέση με την κύρια (μέση) ροή.

Βάσιμη παραδοχή: οι διαλυμένες και αιωρούμενες ουσίες στο θαλάσσιο περιβάλλον θεωρείται ότι δεν επηρεάζουν τις υδροδυναμικές συνθήκες, είτε λόγω της μικρής αναλογίας διαλύματος σε σχέση με τον διαλύτη, είτε λόγω των μικρών τους διαστάσεων κόκκου σε περίπτωση αιωρημάτων.

Συνεπώς, μπορεί να θεωρηθεί ότι οι διαλυμένες και αιωρούμενες ουσίες στο θαλάσσιο περιβάλλον μεταφέρονται και διασπείρονται παθητικά από τη ροή.

Δ.7.12. Μεταφορά και ανάμιξη διαλυμάτων

Μεταφορά, διάχυση και διασπορά συντηρητικών – μη συντηρητικών ρύπων

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι ο όρος παθητικότητα αναφέρεται σε ουσίες/μικροοργανισμούς που παρασύρονται και η κίνησή τους καθορίζεται από την ροή. Έτσι για παράδειγμα, το πλαγκτόν μπορεί να θεωρηθεί παθητικό, ενώ το νηκτόν (π.χ. ψάρια), που έχει δυνατότητα κολύμβησης, θεωρείται ενεργητικό (μη παθητικό).

Σημαντικός είναι ο διαχωρισμός μεταξύ **συντηρητικών** και **μη συντηρητικών ουσιών**. Μια ουσία είναι **συντηρητική** στην περίπτωση **δεν υφίσταται μετασχηματισμό ή φθορά στο υδάτινο περιβάλλον πλην της αραίωσης (dilution)**, όπως συμβαίνει για παράδειγμα με τις **φερτές ύλες** (γαιώδη υλικά και ιζήματα). Αντίθετα, στην περίπτωση που η **διαλυμένη ή αιωρούμενη μάζα μεταβάλλεται λόγω φυσικών διεργασιών πλην της αραίωσης** (π.χ. βιολογική ή χημική αποδόμηση) τότε η ουσία είναι **μη συντηρητική**.

Μία από τις **κύριες βιολογικές διεργασίες** που υφίστανται οι **μη συντηρητικές** ουσίες στο θαλάσσιο περιβάλλον είναι η **βιοαποδόμηση (biodegradation)**, δηλαδή η σταδιακή διάσπαση και κατανάλωση της ουσίας από μικροοργανισμούς.

Η βασική παράμετρος περιγραφής για την περίπτωση διαλυμάτων αλλά και αιωρημάτων είναι η συγκέντρωση, η οποία ορίζεται ως συγκέντρωση μάζας, δηλαδή μάζα ουσίας προς όγκο διαλύματος (π.χ. kg/m^3 ή mg/l), ή ως συγκέντρωση όγκου, δηλαδή ως αδιάστατο ποσοστό (π.χ. % ή ‰).

Δ.7.13. Μοντέλο διάχυσης - διασποράς

Μαθηματικό μοντέλο διάχυσης και διασποράς σε θαλάσσιους αποδέκτες

Η εξέλιξη της συγκέντρωσης λόγω τυρβώδους μεταφοράς-διασποράς αιωρήματος ή διαλύματος, προσδιορίζεται από την ακόλουθη εξίσωση:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial cu}{\partial x} + \frac{\partial cv}{\partial y} + \frac{\partial c(w-w_s)}{\partial z}}_{\text{μεταφορά}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(K_H \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_H \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_V \frac{\partial c}{\partial z} \right)}_{\text{διασπορά}} + \underbrace{\frac{S-L}{\text{όροι πηγής-απώλειας}}}_{\text{όροι πηγής-απώλειας}}$$

c συγκέντρωση του υλικού

u, v, w ταχύτητες του ρευστού στις διευθύνσεις x, y και z, αντίστοιχα

w_s ταχύτητα καθίζησης (η οποία είναι διάφορη του μηδενός μόνο για την περίπτωση αιωρήματος)

K_H και **K_V** συντελεστές τυρβώδους διασποράς μάζας κατά την οριζόντια και κατακόρυφη διεύθυνση

S και **L** όροι πηγής και απώλειας υλικού στη θέση (**S**: *Source* και **L**: *Loss*)

Οι τρεις τελευταίοι όροι του αριστερού μέλους της εξίσωσης εκφράζουν την μεταφορά (advection) του υλικού, ενώ οι τρεις πρώτοι όροι του δεύτερου μέλους εκφράζουν την διασπορά (dispersion) της μάζας. Ως όροι πηγής μπορούν να αναφερθούν σημειακές (π.χ. υποβρύχιοι αγωγοί διάθεσης λυμάτων) ή διάχυτες/κατανεμημένες πηγές (π.χ. βροχόπτωση, εκροές από αγροκαλλιέργειες), ενώ οι όροι απώλειας αναφέρονται κύρια σε μη συντηρητικές ουσίες (π.χ. βιοαποδομήσιμες ουσίες) ή, για την περίπτωση φερτών υλών θα μπορούσαν να αντιστοιχούν, για παράδειγμα, σε διεργασίες απόθεσης ή προσκόλλησης του υλικού στον πυθμένα.

Δ.7.13. Μοντέλο διάχυσης - διασποράς

Μαθηματικό μοντέλο διάχυσης και διασποράς σε θαλάσσιους αποδέκτες

Η επίλυση της βασικής εξίσωσης μεταφοράς – διασποράς στο υπολογιστικό πεδίο, που οριοθετεί τον μελετώμενο παράκτιο χώρο, απαιτεί τον καθορισμό **οριακών συνθηκών** στην **ελεύθερη επιφάνεια της θάλασσας**, στον **πυθμένα** και **(πλευρικά) στις ακτές**.

Στο **όριο της ελεύθερης επιφάνειας** ($z=0$) εφαρμόζεται η **οριακή συνθήκη της μη-διάβασης** (η ουσία δεν μπορεί να διαχυθεί στην ατμόσφαιρα) **τύπου Neumann** και η οριακή συνθήκη πυθμένα ($z=bed$) μπορεί να γραφεί σε μορφή, οι οποία για την περίπτωση αιωρήματος ή διαλύματος γράφεται ως εξής:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{αιώρημα} \\ \text{διάλυμα} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} -w_f c = K_V \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z=0} \\ \frac{\partial c}{\partial z} = [S - L] \Big|_{z=0} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{αιώρημα} \\ \text{διάλυμα} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} K_V \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z=bed} = R_{er} - R_{dep} \\ \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z=bed} = 0 \end{array} \right.$$

όπου για την περίπτωση αιωρήματος, R_{er} και R_{dep} είναι οι **ρυθμοί διάβρωσης ή επαναιώρησης και απόθεσης** υλικού αντίστοιχα. Σημειώνεται, τέλος, ότι στα **όρια ακτών** συνήθως εφαρμόζεται **μηδενισμός της ροής μάζας** **κάθετα προς το όριο**:

$$\frac{\partial c}{\partial n} = 0, \quad \text{όπου } \vec{n} \perp \text{στην ακτή}$$

Στα **ανοιχτά όρια του πεδίου**, π.χ. βαθιά νερά, $(x, y = x_{lim}, y_{lim})$ εφαρμόζεται συνήθως η **οριακή συνθήκη της ελεύθερης διάβασης τύπου Dirichlet**:

$$\text{αιώρημα } c(x, y) \Big|_{x=x_\infty, y=y_\infty} = a, \quad \text{διάλυμα } c(x, y) \Big|_{x=x_\infty, y=y_\infty} = [S - L] \Big|_{x=x_\infty, y=y_\infty}$$

Δ.7.13. Μοντέλο διάχυσης - διασποράς

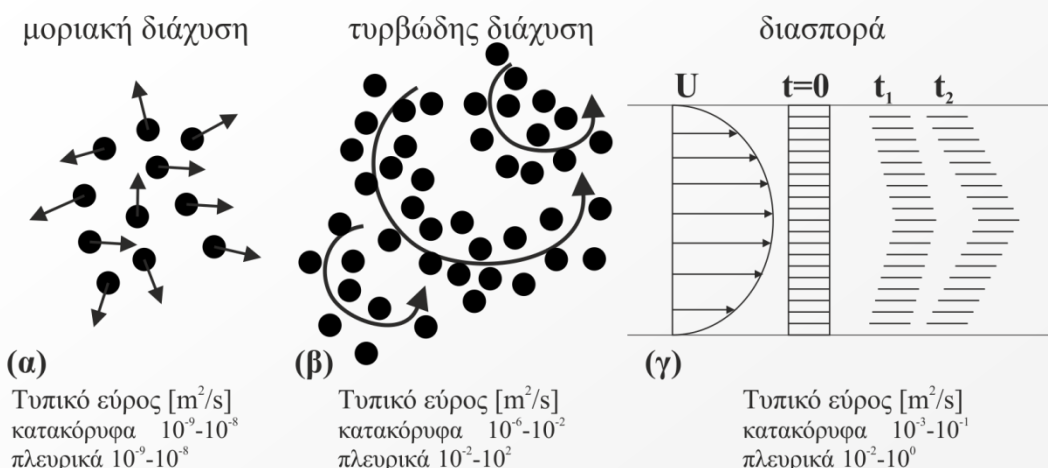
Διάχυση και διασπορά στο θαλάσσιο περιβάλλον

Σημαντικό: διαχωρισμός μεταξύ εννοιών διάχυσης και διασποράς των αιωρημάτων

Η διάχυση της μάζας μπορεί να είναι μοριακή, στην περίπτωση στρωτής ροής ή ακίνητου ρευστού, όπως συμβαίνει για παράδειγμα κατά τη στοχαστική κίνηση Brown των σωματιδίων, ή τυρβώδης, στην περίπτωση κατά την οποία η ροή στο πεδίο εμφανίζει τυρβώδεις στροβίλους.

Προϋπόθεση ώστε η κίνηση των **σωματιδίων** να θεωρηθεί ότι είναι **διαχεόμενη** είναι η **ύπαρξη βαθμίδας συγκέντρωσης αιωρούμενης μάζας**. Σε αντίθετη περίπτωση, όταν δηλαδή η συγκέντρωση στο πεδίο είναι ομογενής, θεωρητικά, η διάχυση δεν έχει καμία επίπτωση στη διαμόρφωση μιας μάζας σωματιδίων, αφού η πλευρική επέκταση του πλουμίου γίνεται με τον ίδιο ρυθμό και προς τις δύο εκατέρωθεν διευθύνσεις. **Τάξη μεγέθους του συντελεστή διάχυσης μάζας:** $10^{-9} \text{m}^2/\text{s}$ περίπτωση μοριακής διάχυσης, έως και $10^2 \text{m}^2/\text{s}$ περίπτωση τυρβώδους διάχυσης.

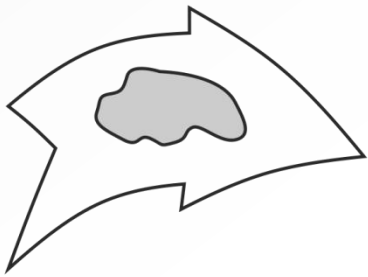
Αντίθετα η περίπτωση της **διασποράς μάζας προϋποθέτει την ανάμιξη του πεδίου ροής λόγω βαθμίδων ταχύτητας. Τάξη μεγέθους Συντελεστή διασποράς:** $10^{-3} \text{m}^2/\text{s} - 100 \text{m}^2/\text{s}$



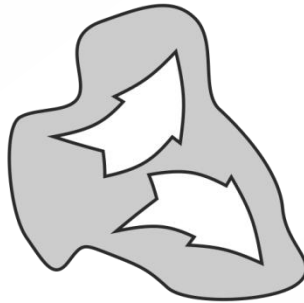
Δ.7.13. Μοντέλο διάχυσης - διασποράς

Διάχυση και διασπορά στο θαλάσσιο περιβάλλον

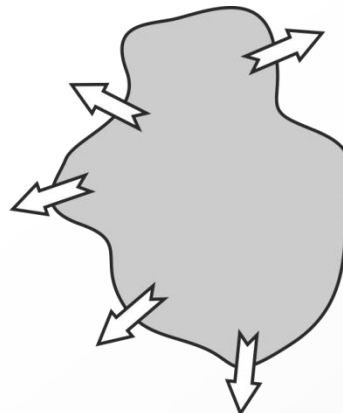
Η κλίμακα των τυρβωδών στροβίλων (και δινών σε υποβιβασμένες χωρικές κλίμακες) είναι σημαντική για τη διαμόρφωση ενός νέφους αιωρούμενου ή διαλυμένου υλικού στο θαλάσσιο περιβάλλον (πλούμιο). Στο σχήμα παρουσιάζεται αυτή η επίδραση στις περιπτώσεις που η στροβιλώδης κίνηση είναι πολύ μεγαλύτερη από το πλούμιο και κατά την οποία η κίνηση είναι ουσιαστικά μεταφορική και το σχήμα παραμένει ανεπηρέαστο (α), στις περιπτώσεις που η κλίμακα των στροβίλων είναι ενδιάμεση και προκαλούνται παραμορφώσεις που επιμηκύνουν τα όρια του πλουμίου (β) και στις περιπτώσεις που η κλίμακα της τύρβης (άρα και οι δίνες) είναι κατά πολύ μικρότερη του σωματιδιακού πλουμίου (γ), στις οποίες κυριαρχεί η διαχυτική δράση, εξομαλύνοντας τις ανομοιογένειες στο σχήμα του.



(α) τύρβη στην οποία κυριαρχεί η μεταφορά



(β) τύρβη στην οποία κυριαρχεί η διασπορά



(γ) τύρβη στην οποία κυριαρχεί η διάχυση

Η επίδραση των διαφορετικών διαστάσεων των στροβιλισμών του τυρβώδους πεδίου στην εξάπλωση ενός πλουμίου

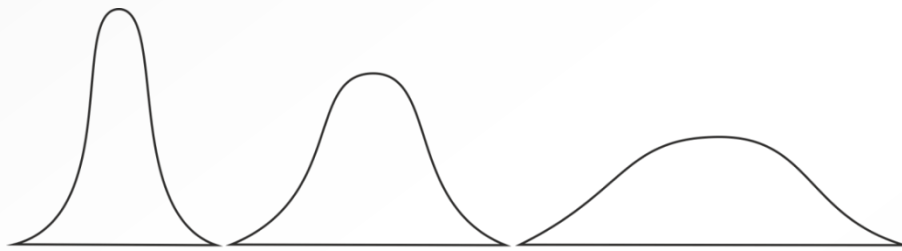
Δ.7.13. Μοντέλο διάχυσης - διασποράς

Ορισμός εννοιών

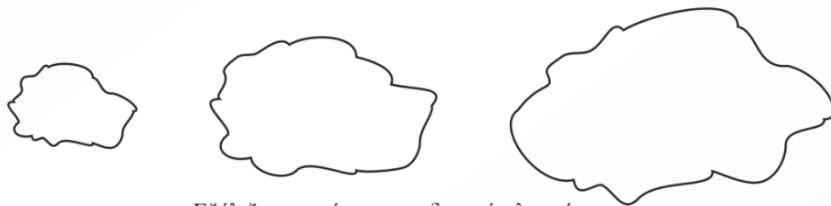
Ο Richardson (1926) μελέτησε την εξέλιξη σωματιδιακού πλουμίου, αποτελούμενου από μεγάλο αριθμό σωματιδίων, από σημειακή, μη συνεχή πηγή, λαμβάνοντας υπόψη το διαχωρισμό μεταξύ των σωματιδίων του πλουμίου. Καθορίζοντας έτσι ως χαρακτηριστική διάσταση l , την τυπική απόκλιση των σωματιδίων από τη μέση θέση τους (Σχήμα), κατέληξε σε συσχέτιση της διάστασης αυτής με το **συντελεστή διάχυσης K** της μορφής:

$$K = a \cdot l^{4/3}$$

όπου l είναι η κλίμακα μήκους (length scale) του συστήματος (Σχήμα) και a μία σταθερά ($O(a)=10^{-3}-10^{-2}$). Η εξίσωση αυτή είναι γνωστή ως «*εκθετικός κανόνας των τεσσάρων-τρίτων*».



Κατανομή των σωματιδίων γύρω από τη μέση θέση (κέντρο μάζας)



Εξέλιξη μορφής σωματιδιακού πλουμίου

↑
 αύξηση του χρόνου διάχυσης →

Σχετική διάχυση περί το κέντρο μάζας ενός σωματιδιακού πλουμίου

Δ.7.13. Μοντέλο διάχυσης - διασποράς

Συντελεστές οριζόντιας και κατακόρυφης ανάμιξης

Μια από τις ευρύτερα διαδεδομένες σχέσεις υπολογισμού του συντελεστή τυρβώδους διασποράς από τις υδροδυναμικές συνθήκες του πεδίου είναι η πρόσεγγιση τύπου Smagorinski (βάσει υπόθεσης Boussinesq):

$$K_H = C_s \cdot dx \cdot dy \sqrt{\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + 0.5\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2}$$

Στην εξίσωση, C_s είναι (ο συντελεστής Smagorinsky) μια σταθερά **εξαρτώμενη** αναλογικά από το **βήμα οριζόντιας διακριτοποίησης του πεδίου** [$\sim 0.01-0.2$].

Η τιμή των συντελεστών διασποράς μπορεί να εκτιμηθεί και από τις αντίστοιχες του τυρβώδους κινηματικού ιξώδους του νερού ν_{ti} από σχέσεις της μορφής:

$$K_i = \beta_i F_{mi} \nu_{ti} \quad i = 1, 2, 3$$

Στην παραπάνω εξίσωση ο δείκτης i παίρνει τιμές 1, 2 και 3 και εκφράζει τις διαστάσεις x , y και z , αντίστοιχα (K_1 και K_2 εκφράζουν το συντελεστή οριζόντιας διασποράς, K_H , και K_3 είναι ο συντελεστής κατακόρυφης διασποράς, K_V).

Η εισαγωγή των συντελεστών β_i και F_{mi} οφείλεται στο διαχωρισμό της ανάμιξης αιωρήματος και νερού και στην μείωση της κατακόρυφης ανάμιξης, αντίστοιχα, ενώ παίρνουν τιμές μεταξύ 0 και 1. Συνήθως θεωρούνται ίσοι με τη μονάδα, εκτός της περίπτωσης στρωμάτωσης της στήλης όπου ο συντελεστής F_{m3} εκτιμάται ως εξίσωση απόσβεσης (βλ. παρακάτω).

Δ.7.13. Μοντέλο διάχυσης - διασποράς

Οριζόντιες και κατακόρυφες κατανομές ταχυτήτων

Ο συντελεστής τυρβώδους ιξώδους μπορεί να προσδιοριστεί από την διατμητική ταχύτητα του πυθμένα u^* και το βάθος ροής h , από τη σχέση:

$$v_{ti} = \alpha_i h u_*, \quad \alpha_i = \begin{cases} 0.3 \sim 3 \frac{m^2}{\text{sec}} \\ 0.24\kappa \left[1 - \left(1 - \frac{2(h - |z|)}{h} \right)^2 \right] \end{cases}, \quad i = 3$$

όπου κ είναι η σταθερά von Karman ($\kappa=0.4$) και $|z|$ η απόσταση από την ελεύθερη επιφάνεια.

Εξετάζοντας την περίπτωση συνδυασμένης επίδρασης κύματος και ρεύματος σε περιοχές μικρού βάθους, ο van Rijn (1986) διατύπωσε την σχέση υπολογισμού του συντελεστή τυρβώδους ιξώδους σε σχέση με το βάθος ροής, h , και την απόσταση από τον πυθμένα, z , ως εξής:

$$V_{t3} = V_{t3,c} + V_{t3,w}$$

$$V_{t3,c} = \begin{cases} 0.25\kappa u_* h \left[1 - \left(1 - \frac{2z}{h} \right)^\eta \right], & \frac{z}{h} < 0.5 \\ V_{tc,\max} & , \frac{z}{h} \geq 0.5 \end{cases}$$

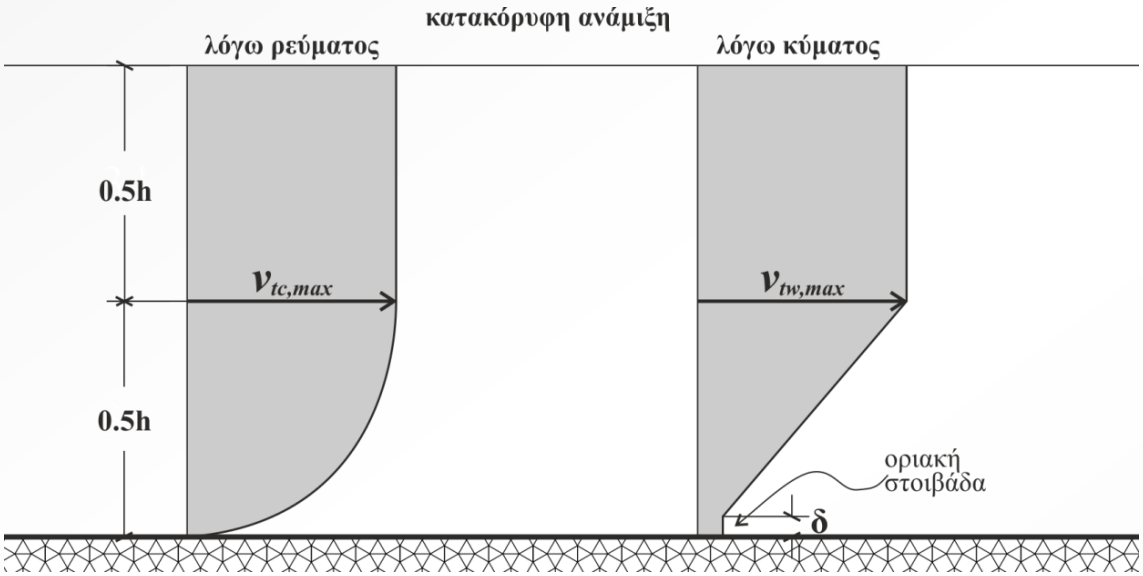
$$V_{t3,w} = \begin{cases} V_{twb} & , z \leq \delta \\ V_{tw,b} + (V_{tw,\max} - V_{tw,b}) \left(\frac{z - \delta}{0.5h - \delta} \right) & , \delta < z < 0.5h \\ V_{tw,\max} & , z \geq 0.5h \end{cases}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta = \begin{cases} 2 - 0.25 \frac{U_{b,w}}{\bar{u}} & , 0 \leq \frac{U_{b,w}}{\bar{u}} \leq 4 \\ 1 & , \frac{U_{b,w}}{\bar{u}} > 4 \end{cases} \\ V_{twb} = 0.00065 \left[\left(\frac{\rho_s - \rho_w}{\rho_w} \frac{g}{v^2} \right)^{1/3} D_{50} \right] \delta U_{b,w} \\ V_{tw\max} = 0.035 \frac{hH}{T} \end{array} \right.$$

Δ.7.14. Οριζόντια - κατακόρυφη ανάμιξη

Απεικόνιση φαινομένου

Στο παραπάνω σύστημα εξισώσεων δ είναι το πάχος της οριακής στοιβάδας (boundary layer), H το ύψος, T η περίοδος κύματος, $U_{b,w}$ η μέγιστη τροχιακή ταχύτητα κοντά στον πυθμένα και η μέση με το βάθος ταχύτητα του κύματος. D_{50} είναι η μέση διάμετρος κόκκου του υλικού πυθμένα και ρ_s και ρ_w είναι πυκνότητα στερεάς και υγρής φάσης (θαλασσινού νερού), αντίστοιχα. Η κατανομή του συντελεστών της εξίσωσης δίνεται γραφικά στο σχήμα:



Αναρρύθμιση συντελεστή κατακόρυφου ιξώδους σε νερά μικρού βάθους λόγω συνδυασμένης δράσης κυμάτων και ρευμάτων.

Η θεωρία μήκους ανάμιξης l_m του Prandtl (Rodi, 1980) συνδέει τον συντελεστή τυρβώδους ιξώδους του πεδίου με τη βαθμίδα ταχύτητας της ροής μέσω της σχέσης:

$$v_{t3} = l_m^2 \left| \frac{\partial U}{\partial z} \right|$$

Δ.7.14. Οριζόντια - κατακόρυφη ανάμιξη

Ειδικά στοιχεία φαινομένου ανάμιξης

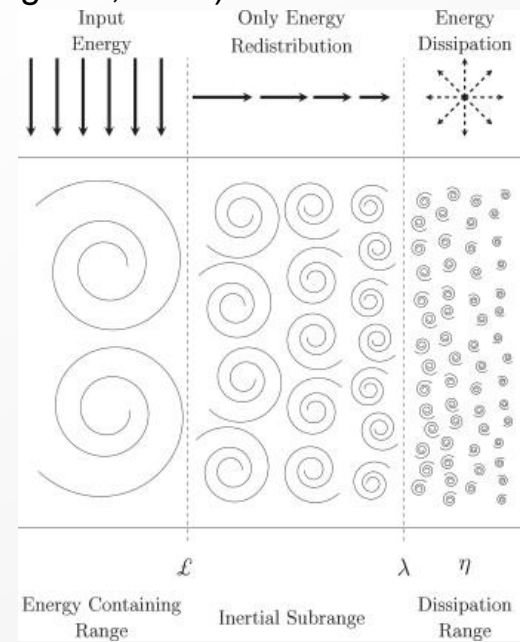
Ο προσδιορισμός του μήκους ανάμιξης είναι ιδιαίτερα πολύπλοκος και απαιτεί την παραμετροποίηση της παραγωγής και απόσβεσης της κινητικής ενέργειας στο πεδίο. **Συνήθης πρακτική για την εκτίμηση του μήκους ανάμιξης** είναι η θεώρησή του ως ποσοστού επί της ελάχιστης χαρακτηριστικής διάστασης της ροής (Rodi, 1980). Τέτοια χαρακτηριστική διάσταση μπορεί να είναι το βάθος ροής της θαλάσσιας περιοχής και στην περίπτωση αυτή θα είναι:

$$l_m = a_1 h, \quad a_1 \approx 7\%$$

Αντίστοιχα στην περίπτωση στρωματωμένης ροής η διάσταση αυτή θα μπορούσε να ληφθεί ίση με το πάχος του επιφανειακού στρώματος. Σε κάθε περίπτωση το μήκος ανάμιξης πρέπει να είναι μεγαλύτερο ή οριακά ίσο με το μήκος Kolmogorov L_K , το οποίο είναι το ελάχιστο μήκος της τυρβώδους ροής (Kolmogorov, 1962):

$$L_K = \left(\frac{v^3}{\varepsilon} \right)^{1/4}$$

$v = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ το *κινηματικό ιξώδες (kinematic viscosity)* του νερού
 ε [m^2/s^3] ο ρυθμός απόσβεσης της τυρβώδους κινητικής ενέργειας
 (*turbulent kinetic energy dissipation rate*)



Δ.7.15. Στρωμάτωση στήλης νερού

Στρωμάτωση στήλης νερού στην κατακόρυφη ανάμιξη

Η κατακόρυφη μετακίνηση αιωρούμενου υλικού και διαλυμάτων επηρεάζεται σημαντικά από την ύπαρξη στρωμάτωσης της στήλης, που μπορεί να οδηγήσει σε συμπεριφορά πλουμίου που καθιζάνει με σημαντικά μειωμένη επιτάχυνση βαρύτητας. Έτσι, η ταχύτητα καθίζησης κατά Stokes δεν μπορεί να περιγράψει τη ροή μάζας π.χ. για τα περισσότερα ποτάμια πλούμια. Στην περίπτωση που η στήλη του νερού είναι στρωματωμένη λόγω αλατότητας, η στρωμάτωση του περιβάλλοντος μπορεί να αποσβέσει την ταχύτητα καθίζησης των σωματιδίων, αλλά και την κατακόρυφή τους διασπορά με αποτέλεσμα τη συγκέντρωση των σωματιδίων κατά μήκος του αλοκλινούς, εωσότου η περιοχή γίνει βαρυτικά ασταθής, δηλαδή μέχρι η πυκνότητα να γίνει μεγαλύτερη από αυτή του υποκείμενου ρευστού και το σωματιδιακό πλούμιο να καθιζάνει λόγω βαρύτητας.

Οι Syvitski et al. (1985), βάσει πειραμάτων σε δελταϊκή περιοχή, διαπίστωσαν την ύπαρξη γραμμικής συσχέτισης μεταξύ του προφίλ της μέσης στο χρόνο συγκέντρωσης φερτών και των αντιστοίχων τιμών αλατότητας με το βάθος:

$$\overline{C}(z) = 99.1 - 2.9\overline{S}(z)$$

Για την εκτίμηση της επίδρασης της στρωμάτωσης, συχνή είναι και η χρήση του **αριθμού Peclet Pe** που εκφράζει την επικράτηση της καθίζησης έναντι της διασποράς, για την έκφραση της σταθερότητας του καθεστώτος στρωμάτωσης σε περιπτώσεις κατά τις οποίες:

$$Pe = \frac{w_s h}{K_m} \ll 1$$

όπου h το εύρος της ζώνης ανάμιξης και K_m ο συντελεστής διασποράς μάζας.

Δ.7.15. Στρωμάτωση στήλης νερού

Σταθερότητα στρωμάτωσης βάσει του αριθμού Richardson

Μια από τις ευρύτερα χρησιμοποιούμενες μεθόδους για τον καθορισμό της σταθερότητας της στρωμάτωσης είναι ο **αδιάστατος αριθμός Richardson** με κριτήριο σταθερότητας, τιμές του μεγαλύτερες του $\frac{1}{4}$ (Turner, 1973):

$$Ri = \frac{N^2}{\left(\frac{\partial U}{\partial z}\right)^2} > \frac{1}{4}, \quad N = \sqrt{-\frac{g}{\rho_w} \frac{\partial \rho_w}{\partial z}}$$

$$Ri = \frac{\text{buoyancy term}}{\text{flow shear term}} = \frac{g}{\rho} \frac{\nabla \rho}{(\nabla u)^2}$$

όπου N η συχνότητα Brunt-Väisälä, U η μέση οριζόντια ταχύτητα ροής, g η επιτάχυνση της βαρύτητας και ρ_w η πυκνότητα του θαλασσινού νερού. Σε περιπτώσεις που οι τιμές του Ri είναι μικρότερες του $\frac{1}{4}$ είναι πιθανή η εμφάνιση ασταθειών τύπου Kelvin-Helmholtz. Βάσει του κριτηρίου αυτού, η επίδραση της στρωμάτωσης στη διάχυση μάζας συχνά εκφράζεται, σύμφωνα με την θεωρία μήκους ανάμιξης (mixing-length theory), με την εφαρμογή εξισώσεων απόσβεσης της ταχύτητας και της διασποράς μάζας $F_{m,3}$:

$$F_{m,3} = (1 + \beta Ri)^\alpha$$

Οι τιμές των συντελεστών α και β είναι -0.5 και 10 αντίστοιχα. Για τους ίδιους συντελεστές ο Toorman (2002) προτείνει τις τιμές -0.8 και 21.

Σε αντικατάσταση της χρήσης του αδιάστατου αριθμού Richardson είναι συνήθης πρακτική η χρήση του **ροϊκού αριθμού Richardsdon (flux Richardsdon number) R_f** , που είναι ο λόγος των ανωστικών δυνάμεων προς την παραγωγή τυρβώδους κινητικής ενέργειας (Lewis, 1997):

$$R_f = \frac{\overline{g \rho_w w}}{\rho_w \overline{uw} \frac{\partial U}{\partial z}} = \frac{K_V}{v_{t3}} Ri \leq R_{f,crit} = 0.15 - 0.5$$

Δ.7.15. Στρωμάτωση στήλης νερού

Επίδραση στρωμάτωσης στην ταχύτητα καθίζησης

Σχετικά με την ανάμιξη επιφανειακού πλουμίου γλυκού νερού συναρτήσει της ταχύτητας παγίδευσής του στο κατώτερο στρώμα W_e έχουν διατυπωθεί σχέσεις της μορφής:

$$W_e = \frac{e_1 U_o}{Ri}$$

όπου U_o είναι η ταχύτητα του κατώτερου στρώματος και e_1 εμπειρικός συντελεστής ($\sim 10^{-3}$).

Στην περίπτωση σωματιδιακού πλουμίου, αποτελούμενο από N_p σωματίδια, που καθιζάνει σε στρωματωμένο περιβάλλον, η συμπεριφορά του κατά την καθίζηση μπορεί να περιγραφεί από τον αριθμό N_{sc} του νέφους:

$$N_{sc} = \frac{w_s}{Q^{0.25} N^{0.5}}, \quad Q = \frac{(\rho_b - \rho_w)}{\rho_w} V \cdot g$$

Στην παραπάνω σχέση w_s είναι η ταχύτητα καθίζησης των σωματιδίων, N η συχνότητα Brunt-Väisälä, V είναι ο όγκος του νέφους και Q η άνωσή του. Βάσει του κριτηρίου N_{sc} προσδιορίζεται η ικανότητα της στρωμάτωσης να παγιδεύσει ή όχι μέρος του νέφους φερτών.

Έτσι για τιμές $N_{sc} > 1$ το νέφος καθιζάνει ως τυρβώδης πίδακας μέχρι να φτάσει το βάθος Z_f :

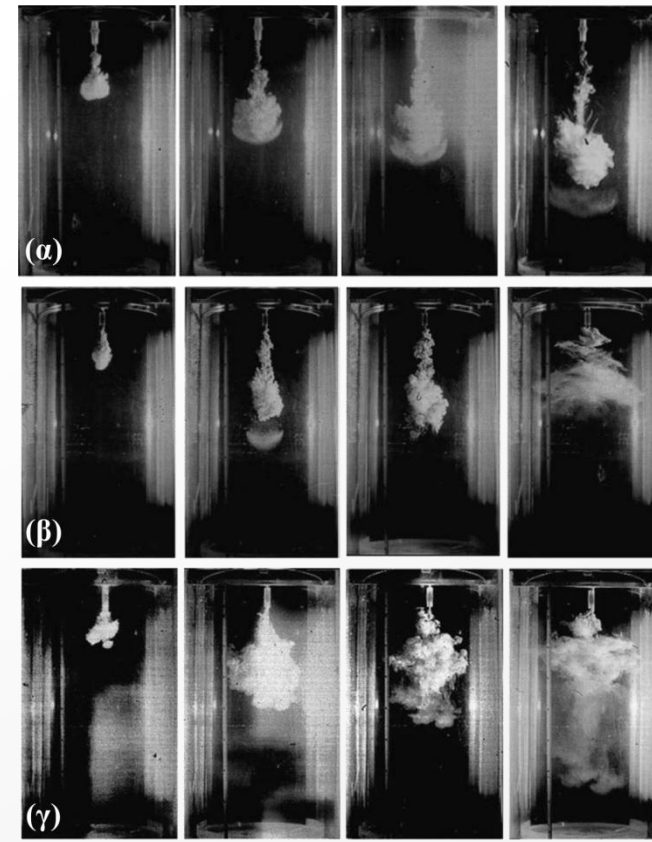
$$Z_f = \begin{cases} C_1 \cdot r \left(\frac{\sqrt{Q}}{w_s r} \right)^{0.83} & \text{για } \text{Re}_p = \frac{w_s r}{\nu} \leq 300 \quad \{C_1 = 11 \pm 2\} \\ C_1 \cdot r \sqrt{N_p} & \text{για } \text{Re}_p = \frac{w_s r}{\nu} > 300 \quad \{C_1 = 9 \pm 2\} \end{cases}$$

Δ.7.15. Στρωμάτωση στήλης νερού

Επίδραση στρωμάτωσης στην ταχύτητα καθίζησης

Στην παραπάνω σχέση r είναι η ακτίνα του θεωρούμενου σφαιρικού σωματιδίου. Πέραν του βάθους αυτού τμήμα του νέφους, παίρνοντας τη μορφή σφαιρικής μάζας, εξέρχεται του νέφους και τελικά καθιζάνει (Εικ. α). Η μάζα που δεν εξήλθε του νέφους συνεχίζει να καθιζάνει λόγω αδράνειας και, στη συνέχεια, αναδύεται σε βάθος Z_R ($=\frac{3}{4}Z_f$), όπου διαμορφώνεται σαν ουδέτερο νέφος (Εικ. β). Για τιμές $N_{sc} < 1$ το νέφος καθιζάνει και διαμορφώνει ένα ρεύμα βαρύτητας στο ουδέτερό του (βαρυτικά) βάθος (Εικ. γ), Z_N :

$$Z_N = C_2 \frac{Q^{0.25}}{N^{0.5}} \quad \{C_2 = 2.6 \pm 0.4\}$$



Εικόνα Νέφος σωματιδίων που καθιζάνει σε ομογενές περιβάλλον

(α) σε στρωματωμένο περιβάλλον με $N_{sc} > 1$

(β) και σε στρωματωμένο περιβάλλον με $N_{sc} < 1$

(γ) [πηγή: Bush et al. (2003)]

Δ.7.16. Όροι πηγής/απώλειας διαλύματος

Παραδείγματα όρων πηγής/απώλειας

Όπως αναφέρθηκε και αρχικά, ανάλογα με τον τύπο του υλικού σε αιώρηση (συντηρητικό ή μη, σωματιδιακή ή διαλυμένη φάση) μπορεί να υπάρχουν διαφορετικές, ανά περίπτωση, πηγές υλικού (είσοδος του στο θαλάσσιο περιβάλλον) ή/και όροι απώλειας (ρυθμός απώλειας μάζας). Κάποια παραδείγματα όρων πηγής και απώλειας δίνονται στον παρακάτω πίνακα (Πίνακας) και αναλύονται περαιτέρω στις υποενότητες που ακολουθούν.

Φάση υλικού	Όροι πηγής	Όροι απώλειας
σωματιδιακή (π.χ. φερτές ύλες)	<ul style="list-style-type: none"> - ποτάμια (στερεομεταφορά) - διάβρωση πυθμένα - ατμόσφαιρα (από αιολική διάβρωση) 	<ul style="list-style-type: none"> - απόθεση - διαφυγή προς την ανοιχτή θάλασσα
διαλυμένη (π.χ. βιοαποδομήσιμος ρύπος)	<ul style="list-style-type: none"> - ποτάμια - αγωγοί διάθεσης λυμάτων - βροχόπτωση 	<ul style="list-style-type: none"> - βιοαποδόμηση - κατανάλωση από μικροοργανισμούς



Πίνακας Παραδείγματα όρων πηγής και απώλειας υλικού ανάλογα με το είδος της ουσίας που εισέρχεται στο θαλάσσιο περιβάλλον

Δ.7.16. Όροι πηγής/απώλειας διαλύματος

Όροι πηγής

Οι όροι πηγής υλικού εκφράζονται στην εξίσωση ως **ρυθμοί εισροής συγκέντρωσης** στο πεδίο dC_{in}/dt . Έτσι, στη γενική περίπτωση που η εισροή υλικού μεταβάλλεται στο χώρο (x,y,z) , αλλά και στο χρόνο (t) μια γενική σχέση του όρου πηγής, είτε πρόκειται για διαλυμένο, είτε για αιωρούμενο υλικό, θα μπορούσε να γραφεί:

$$S = \frac{d}{dt} C_{in} (x, y, z, t)$$

Άρα, στην περίπτωση που επιλύεται η εξίσωση μεταφοράς-διασποράς ποτάμιων φερτών, ο ρυθμός εισροής θα ισούται με την ανηγμένη παροχή φερτών ($m^3/s/m^2$) στη θέση εκβολής του ποταμού, ενώ για την περίπτωση αγωγού διάθεσης λυμάτων θα ισούται με το ρυθμό εισροής συγκέντρωσης της ουσίας που μελετάται στη θέση εισόδου στο πεδίο. Επιπλέον, στο όριο του θαλάσσιου πυθμένα μπορεί να εισέλθουν συγκεντρώσεις λόγω διάβρωσης, οπότε θα έχουμε ως όρο πηγής την παράμετρο R_{er} της οριακής συνθήκης πυθμένα.

Στην περίπτωση διερεύνησης της μεταφοράς-διασποράς μικροοργανισμών, οι όροι πηγής αναφέρονται στους ρυθμούς γέννησης και σωματικής αύξησης των ατόμων (βλ. 3^η Διάλεξη).

Δ.7.16. Όροι πηγής/απώλειας διαλύματος

Όροι απώλειας

Οι όροι απώλειας συγκέντρωσης, εκφράζονται, όπως και οι όροι πηγών, ως ρυθμός μεταβολής συγκέντρωσης. Στην περίπτωση που πρόκειται για αποδομήσιμη ουσία (όπως π.χ. στην περίπτωση μικροβιακού φορτίου), η μεταβολή της συγκέντρωσης είναι εκθετική σχέση του ρυθμού αποδόμησης λ . Έτσι, αν c_0 η αρχική συγκέντρωση, τότε έχουμε για το ρυθμό αποδόμησης υλικού και τον αντίστοιχο όρο απώλειας L :

$$c = c_0 \exp(-\lambda \cdot t) \Rightarrow \frac{dc}{dt} = \frac{d[c_0 \exp(-\lambda \cdot t)]}{dt} = -\lambda \cdot c_0 \exp(-\lambda \cdot t) \Rightarrow$$

$$L = -\lambda \cdot c, \quad \lambda = \frac{-\ln(0.1)}{T_{90}}$$

T_{90} είναι ο **χρόνος ημίσειας ζωής** (half-life), δηλαδή ο χρόνος που απαιτείται για τη μείωση της αρχικής συγκέντρωσης στο μισό ($c=c_0/2$). Ο χρόνος ημίσειας ζωής (ή ημιζωής) διαφέρει μεταξύ των ουσιών.

Ενδεικτικά: 13 hrs για κυανούχα άλατα, 43 hrs για φαινολικές ενώσεις, 1-2 εβδομάδες για τα απορρυπαντικά και τα λάδια κινητήρων, 3-6 μήνες για τη λιγνίνη και τα παράγωγά της και φτάνει σε κάποια χρόνια για σύνθετες χημικές ενώσεις, έως και 20 χρόνια για φυτοφάρμακα και ζιζανιοκτόνα (Τσακογιάννης, 1985).

Για ραδιενεργές ουσίες ο χρόνος ημιζωής κυμαίνεται μεταξύ δεκάδων έως και χιλιάδων ετών, οπότε είναι πρακτικά άπειρος. Για την περίπτωση φερτών υλών, όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, οι όροι απώλειας αναφέρονται σε διεργασίες απόθεσης του υλικού (R_{dep}) και πρόκειται ουσιαστικά για έξοδο του υλικού από τη ροή (στήλη του νερού). Για μικροοργανισμούς, ο όρος απώλειας περιλαμβάνει τη θνησιμότητα, θήρευσης κ.λπ.

Δ.7.17. Μέθοδος του ιχνηθέτη

Ορισμός μεθόδου

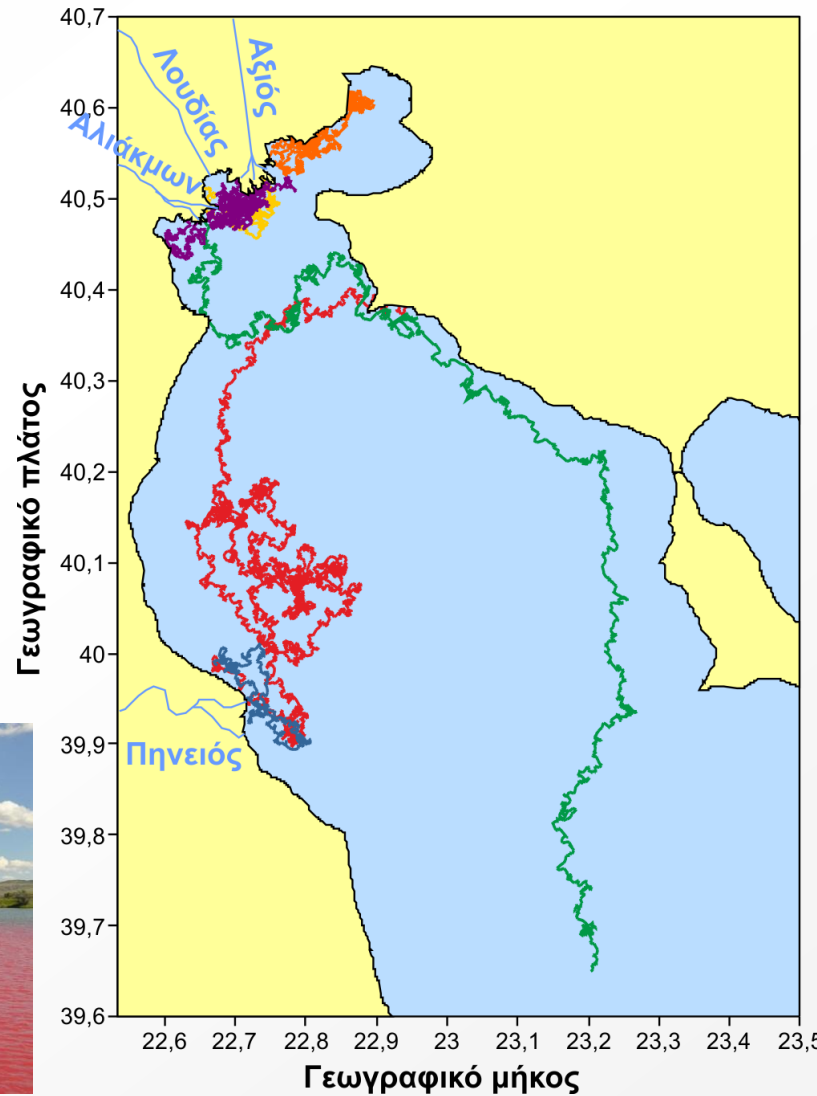
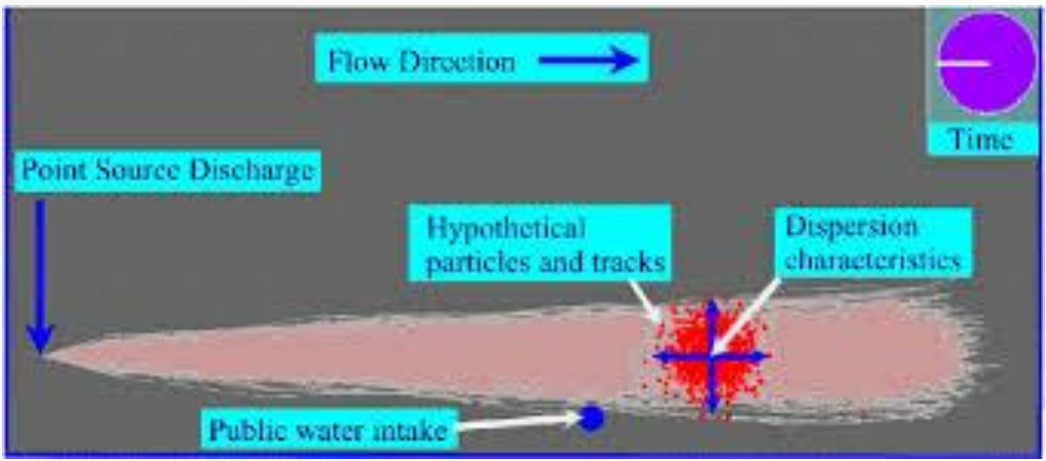
Στις παραπάνω εξισώσεις, οι ταχύτητες με υπεργράμμιση συμβολίζουν τιμές ταχύτητας ροής κατά x , y και z , στη θέση του σωματιδίου i και αποτελούν το καθοριστικό μέρος της κίνησης (για την κατακόρυφη διεύθυνση στο καθοριστικό μέρος μετέχει και η ταχύτητα καθίζησης), που εκφράζει τη μεταφορά, ενώ οι τιμές u_i' , v_i' και w_i' αποτελούν το στοχαστικό μέρος, που εκφράζει τη διασπορά. Το εύρος της στοχαστικής κίνησης εξαρτάται από την τιμή του αντίστοιχου συντελεστή διασποράς (οριζόντιου ή κατακόρυφου) και η τελική στοχαστική μετατόπιση του σωματιδίου προκύπτει με πολλαπλασιασμό του εύρους αυτού με τυχαίο αριθμό ξ , του οποίου οι τιμές μεταβάλλονται μεταξύ -1 και $+1$.

Όροι πηγής και απώλειας υλικού μπορούν εύκολα να εισαχθούν σε ένα μοντέλο ιχνηθέτη. Οι πηγές υλικού αντιστοιχούν σε θέσεις εισόδου σωματιδίων στο χώρο, ενώ απώλεια υλικού εφαρμόζεται απευθείας στο κάθε σωματίδιο, με μείωση π.χ. της μάζας του βάσει του ρυθμού αποδόμησης, εάν πρόκειται για βιοαποδομήσιμο ρύπο ή με απόθεση υλικού εάν πρόκειται για φερτές ύλες που έχουν φτάσει, λόγω καθίζησης, στον πυθμένα. Στα πλεονεκτήματα της μεθόδου ανήκουν η δυνατότητα παρακολούθησης της τροχιάς κίνησης και των μεταβολών στα χαρακτηριστικά του κάθε σωματιδίου για το σύνολο της κίνησής του (από τη στιγμή που εισήλθε στο πεδίο μέχρι και την έξοδό του από τη ροή).

Δ.7.17. Μέθοδος του ιχνηθέτη

Απεικόνιση Αποτελεσμάτων Μοντέλου

Ένα τέτοιο παράδειγμα παρακολούθησης της κίνησης λεπτόκοκκων φερτών υλών που προέρχονται από τα ποτάμια της περιοχής του Θερμαϊκού Κόλπου δίνεται στο ακόλουθο σχήμα.



Δ.7.18. Διασπορά ρύπων - ποιότητα υδάτων

Μεταφορά και διάχυση ρύπων – ποιότητα υδάτων

Για την έκφραση της εξέλιξης των φυσικοχημικών παραμέτρων στο θαλάσσιο περιβάλλον είναι σημαντικός ο **διαχωρισμός των διεργασιών** που λαμβάνουν χώρα **στη στήλη του νερού (pelagic processes)**, αυτών που λαμβάνουν χώρα στο **ίζημα (benthic processes)** και της **ανταλλαγής μεταξύ τους (benthic-pelagic coupling)**. Έτσι, εάν συμβολίσουμε ως c_p τη συγκέντρωση μιας παραμέτρου στη στήλη (πελαγική) και c_b τη συγκέντρωσή της στο ίζημα (πυθμενική), η γενική σχέση μεταφοράς διασποράς της ουσίας γράφεται:

$$\frac{\partial c_p}{\partial t} + \frac{\partial c_p \cdot u}{\partial x} + \frac{\partial c_p \cdot v}{\partial y} + \frac{\partial c_p \cdot (w - w_s)}{\partial z} = K_H \left(\frac{\partial^2 c_p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_p}{\partial y^2} \right) + K_V \frac{\partial^2 c_p}{\partial z^2} + \left. \frac{\partial c_p}{\partial t} \right|_{bio} + \left. \frac{\partial c_p}{\partial t} \right|_{bed}$$

$$\frac{\partial c_b}{\partial t} = \left. \frac{\partial c_b}{\partial t} \right|_{bio} + \left. \frac{\partial c_b}{\partial t} \right|_{bed}$$

Οι δύο τελευταίοι όροι στις παραπάνω σχέσεις εκφράζουν ρυθμούς μεταβολής συγκέντρωσης λόγω βιοχημικών διεργασιών (με δείκτη 'bio') και λόγω ανταλλαγής υλικού μεταξύ στήλης και πυθμένα (με δείκτη 'bed'). Οι εξισώσεις αυτές μπορούν να χρησιμοποιηθούν (με μικρές, κατά περίπτωση, τροποποιήσεις) για:

- διαλυμένα αέρια, όπως O_2 (DO), CO_2 , N (στήλη και πυθμένας)
- διαλυμένα θρεπτικά άλατα, όπως νιτρικά, φωσφορικά και πυριτικά (στήλη και πυθμένας)
- είδη φυτοπλαγκτού και ζωοπλαγκτού (στήλη)
- βακτήρια (στήλη και πυθμένας)
- διαλυμένο και σωματιδιακό οργανικό υλικό (DOM και POM) (στήλη και πυθμένας)
- βενθικούς (μικρο-)οργανισμούς (πυθμένας)

Δ.7.18. Διασπορά ρύπων - ποιότητα υδάτων

Βιοχημικές διεργασίες

Με τον τρόπο αυτό μπορεί να καταστρωθεί ένα πλήρες οικολογικό μοντέλο, που περιγράφει την εξέλιξη του συνόλου των κύριων βιοχημικών διεργασιών που επηρεάζουν την τροφική αλυσίδα στο θαλάσσιο πεδίο. Το γενικευμένο μοντέλο των εξισώσεων χρειάζεται να τροποποιηθεί για τη σωστή προσομοίωση των διεργασιών και πιο συγκεκριμένα:

- να **μηδενιστεί η ταχύτητα καθίζησης** όταν πρόκειται για τα **αιωρούμενα υλικά** (αέρια, θρεπτικά, DOM)
- να **οριστούν κατάλληλα οι ρυθμοί απώλειας/πηγής** των παραμέτρων, όπως αυτές ορίζονται από την τροφική αλυσίδα (κύκλοι άνθρακα, αζώτου και φωσφόρου): έτσι, για παράδειγμα, η βόσκηση (grazing) του φυτοπλαγκτού από το ζωοπλαγκτό προκαλεί μείωση της συγκέντρωσης του πρώτου (θάνατος) και αύξηση της συγκέντρωσης του δεύτερου (αύξηση σωματικού βάρους), ενώ η διαδικασία φωτοσύνθεσης από το φυτοπλαγκτό προκαλεί παραγωγή O_2 και κατανάλωση CO_2
- να **τεθούν κατάλληλες οριακές συνθήκες** για τις **ανταλλαγές μεταξύ θαλάσσιας στήλης και πυθμένα**: π.χ. η αποδόμηση του POM, που καθιζάνει στον πυθμένα από αναερόβια βακτήρια, προκαλεί μείωση της συγκέντρωσης του POM στο βένθος, αύξηση της μάζας των βακτηριδίων και ταυτόχρονη αύξηση της συγκέντρωσης των θρεπτικών λόγω απεκκρίσεων
- να **οριστούν κατάλληλα οι περιορισμοί** για την **ανάπτυξη φυτο-ζωοπλαγκτού**, όπως ο λόγος ***N/P*** (βλ. 3^η Διάλεξη).
- για ομάδες που υπάρχουν στο ένα από τα δύο πεδία (βενθικό/πελαγικό), όπως βενθικά μακρόζωα και πλαγκτόν, οι εξισώσεις θα πρέπει να οριστούν στο πεδίο αυτό και μόνο.

Δ.7.18. Διασπορά ρύπων - ποιότητα υδάτων

Φυσικές διεργασίες

Εξισώσεις τύπου μεταφοράς-διασποράς μπορούν να εφαρμοστούν και για την περίπτωση **φυσικών παραμέτρων**, όπως η **θερμοκρασία** και η **αλατότητα**, αντιμετωπίζοντάς τις ως **διαλύματα**. Έτσι, η εξίσωση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη ισορροπία θερμοκρασίας **T** και αλατότητας **S** στο τρισδιάστατο θαλάσσιο πεδίο.

Οι οριακές συνθήκες επιφάνειας ($z=0$) και πυθμένα ($z=bed$) για την ισορροπία θερμοκρασίας **T**, στις οποίες ορίζονται και οι ρυθμοί απώλειας και εισροής θερμότητας στο υδάτινο πεδίο, γράφονται:

$$\begin{cases} K_V \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = Q_T = Q_s - Q_b - Q_e \pm Q_h \\ K_V \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=bed} = 0 \end{cases}$$

Στην οριακή συνθήκη επιφάνειας ($z=0$) εξισώνεται ο ρυθμός κατακόρυφης διάχυσης θερμότητας με το αλγεβρικό άθροισμα των προς τα κάτω και προς τα πάνω ροών θερμότητας και ακτινοβολίας. Οι ροές θερμότητας αυτές διαμέσου της διεπιφάνειας ατμόσφαιρας-θάλασσας προκύπτουν από την μεγάλη και μικρού μήκους ηλιακή ακτινοβολία, από θερμοκρασιακές διαφορές μεταξύ ατμόσφαιρας και επιφανειακού θαλάσσιου στρώματος και από ανταλλαγές μαζών λόγω εξάτμισης-κατακρίμνησης. Το θερμικό ισοζύγιο προκύπτει από την εισερχόμενη μικρού μήκους ηλιακή ακτινοβολία (Q_s), την επανεκπεμπόμενη μεγάλη μήκους ακτινοβολία (Q_b), την απώλεια θερμότητας λόγω εξάτμισης (Q_e) και τις ανταλλαγές θερμότητας με την ατμόσφαιρα μέσω αγωγής (Q_h). Στο όριο του θαλάσσιου πυθμένα ($z=bed$) η κατακόρυφη ροή θερμότητας συνήθως ορίζεται μηδενική.

Δ.7.18. Διασπορά ρύπων - ποιότητα υδάτων

Φυσικές διεργασίες

Στην περίπτωση της αλατότητας S οι αντίστοιχες οριακές συνθήκες μπορούν να γραφούν ως:

$$\begin{cases} K_V \left. \frac{\partial S}{\partial z} \right|_{z=0} = (-PF + EF - RF) \cdot S \Big|_{z=0} \\ K_V \left. \frac{\partial S}{\partial z} \right|_{z=bed} = 0 \end{cases}$$

Δεδομένου ότι το **άλας** είναι **συντηρητική ουσία** η οποία **δεν μπορεί να διαφύγει** στην **ατμόσφαιρα** (π.χ. κατά την εξάτμιση διαφεύγει μόνο νερό προς την ατμόσφαιρα, ενώ το περιεχόμενο στην εξατμισθείσα μάζα άλας παραμένει στο επιφανειακό στρώμα), ο ρυθμός απώλειας άλατος στην επιφάνεια πρακτικά είναι μηδενικός. Η μεταβολή αλατότητας προκύπτει από την ισορροπία εισροής γλυκού ή υφάλμυρου νερού και την επιφανειακή αλατότητα του θαλάσσιου περιβάλλοντος. Έτσι, στο παραπάνω παράδειγμα σημειώθηκαν η ροή κατακρήμνισης (**PF: Precipitation Flux**), η ροή εξάτμισης (**EF: Evaporation Flux**) και η ποτάμια εισροή (**RF: Riverine Flux**). Η ροή εξάτμισης έχει θετικό πρόσημο (προκαλεί δηλαδή αύξηση αλατότητας), αφού συνεπάγεται πρακτικά τη μείωση του όγκου νερού στο οποίο περιέχεται μια ορισμένη μάζα άλατος. Τέλος, όπως και στην περίπτωση της θερμοκρασίας, η ροή άλατος από το νερό στον θαλάσσιο πυθμένα τυπικά θεωρείται ίση με μηδέν· στην περίπτωση βέβαια που υπάρχει εισροή γλυκού ή υφάλμυρου νερού κοντά στον πυθμένα, όπως μπορεί να συμβεί στην περίπτωση αγωγού διάθεσης λυμάτων ή και μιας θέσης υποθαλάσσιας ανάβλυσης, τότε η οριακή συνθήκη πυθμένα πρέπει να τροποποιηθεί κατάλληλα, ώστε να ληφθεί η ανάμιξη μαζών διαφορετικής αλατότητας.

Δ.7.18. Διασπορά ρύπων - ποιότητα υδάτων

Αποδομήσιμοι ρύποι

Εξετάζοντας την περίπτωση εισροής ενός βιοαποδομήσιμου ρύπου στο θαλάσσιο περιβάλλον (τρισεδιάστατος χώρος), που αντιστοιχεί στην απλούστερη μορφή ενός 'μοντέλου ποιότητας', μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε δύο παραμέτρους, μία που εκφράζει τη **συγκέντρωση διαλυμένου οξυγόνου (*DO, Dissolved Oxygen*)** στο πεδίο και μία τη **συγκέντρωση απαιτούμενου οξυγόνου (*OD, Oxygen Demand*)**, που ουσιαστικά εκφράζει και ισούται με τη συγκέντρωση του ρυπαντή στο πεδίο (c_p). Σημειώνεται ότι η συγκέντρωση ρύπου μπορεί να αναφέρεται είτε στο βιολογικώς είτε στο χημικώς απαιτούμενο οξυγόνο (*Biological Oxygen Demand: BOD, Chemical Oxygen Demand: COD*) Έτσι, γράφοντας τη βασική εξίσωση μεταφοράς διασποράς για την περίπτωση του διαλυμένου οξυγόνου (*DO*), έχουμε:

$$\frac{dDO}{dt} + \frac{\partial DO \cdot u}{\partial x} + \frac{\partial DO \cdot v}{\partial y} + \frac{\partial DO \cdot w}{\partial z} = K_H \left(\frac{\partial^2 DO}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 DO}{\partial y^2} \right) + K_V \frac{\partial^2 DO}{\partial z^2} + S_{DO} - L_{DO}$$

$$\begin{cases} L_{DO} = K_1 \cdot c_p \\ S_{DO}|_{z=0} = K_2 (DO_{SAT} - DO|_{z=0}) + P(dt)|_{z=0} \end{cases}$$

Δ.7.18. Διασπορά ρύπων - ποιότητα υδάτων

Αποδομήσιμοι ρύποι

Οι σταθερές K_1 και K_2 είναι συντελεστές βιοαποσύνθεσης και αναέρωσης, αντίστοιχα, ενώ η οριακή συνθήκη πηγής οξυγόνου εφαρμόζεται μόνο στην ελεύθερη επιφάνεια, στην οποία DO_{SAT} είναι η συγκέντρωση κορεσμού οξυγόνου και $P(dt)$ το οξυγόνο που παράγεται κατά τη φωτοσύνθεση (βλ. 3^η Διάλεξη). Ο συντελεστής βιοαποσύνθεσης κυμαίνεται μεταξύ 10^{-7} και $2 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$, με τις μεγαλύτερες τιμές να ισχύουν για ρυπαντικά επιβαρυμένες υδάτινες μάζες και ο συντελεστής αναέρωσης μεταξύ $1.5 \cdot 10^{-5}$ και 10^{-4} s^{-1} , με την τιμή να αυξάνει με την ταχύτητα ροής (Τσακογιάννης, 1985).

Παράλληλα, η απώλεια οξυγόνου (LDO) προκύπτει από την αποδόμηση της συγκέντρωσης ρύπου την οποία έχουμε εκφράσει ως βιολογικά ή χημικά απαιτούμενη συγκέντρωση οξυγόνου. Έτσι, θα ισούται με το γινόμενο της συγκέντρωσης ρύπου c_p και του ρυθμού βιοαποσύνθεσης K_1 . Η εκτίμηση της συγκέντρωσης οξυγόνου που παράγεται από τη φωτοσύνθεση σε στοιχειώδες διάστημα χρόνου dt μπορεί να προσδιοριστεί από την ολοκλήρωση της ημιτονοειδούς εξίσωσης:

$$P_{max}: \text{μέγιστη φωτοσυνθετική ικανότητα της υδάτινης περιοχής και εξαρτάται από ύπαρξη φωτοσυνθετικών οργανισμών (2-22 mg O}_2\text{/lt)}$$

$$P(dt)_{z=0} = \begin{cases} \int_t^{t+dt} P_{max} \sin\left(\pi \frac{t-t_s}{p}\right) dt & \text{για } t_s < t < t_s + p \\ 0 & \text{για } t_s + p \leq t \leq t_s + 86400 \end{cases} \Rightarrow$$

$$P(dt)_{z=0} = \begin{cases} P_{max} \left[\frac{1}{\pi} \left(\cos\left(\frac{\pi t}{p}\right) - \cos\left(\frac{\pi(t+dt)}{p}\right) \right) \right] & \text{για } t_s < t < t_s + p \\ 0 & \text{για } t_s + p \leq t \leq t_s + 86400 \end{cases}$$

Δ.7.18. Διασπορά ρύπων - ποιότητα υδάτων

Αποδομήσιμοι ρύποι

Η αντίστοιχη εξίσωση μεταφοράς-διασποράς για τη συγκέντρωση ρύπου c_p γράφεται:

$$\frac{\partial c_p}{\partial t} + \frac{\partial c_p \cdot u}{\partial x} + \frac{\partial c_p \cdot v}{\partial y} + \frac{\partial c_p \cdot w}{\partial z} = K_H \left(\frac{\partial^2 c_p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_p}{\partial y^2} \right) + K_V \frac{\partial^2 c_p}{\partial z^2} + S_{c_p} - L_{c_p}$$

$$\begin{cases} L_{c_p} = L_{DO} = K_1 \cdot c_p \\ S_{c_p} \Big|_{source} = \frac{\partial c_p}{\partial t} \Big|_{source} \end{cases}$$

Ο όρος πηγής της συγκέντρωσης ρύπου ισούται με το ρυθμό εισροής του στο πεδίο (στις παραπάνω εξισώσεις θεωρήθηκε συνεχής εισροή με το χρόνο), ενώ η απώλεια ρύπου ισούται με την αντίστοιχη κατανάλωση οξυγόνου για την αποδόμηση (δηλαδή τον όρο απώλειας του διαλυμένου οξυγόνου). Ο συνδυασμός των παραπάνω εξισώσεων μπορεί να αποτελέσει ένα απλοποιημένο «μοντέλο ποιότητας» στο θαλάσσιο πεδίο και μπορεί να επιλυθεί αριθμητικά γράφοντας τις διαφορικές εξισώσεις με τη μορφή πεπερασμένων διαφορών και επιλύοντάς τες σταδιακά στο χώρο (x,y,z) και στο χρόνο (t) .

Για αρχικές συνθήκες στο πεδίο (γνωστή συγκέντρωση ρυπαντή και διαλυμένου οξυγόνου σε χρόνο t_0) εφαρμόζεται η παρούσα εξίσωση για τον προσδιορισμό της συγκέντρωσης c_p και η προηγούμενη εξίσωση για τον προσδιορισμό της συγκέντρωσης DO στο επόμενο χρονικό βήμα $(t_1=t_0+dt)$. Εν συνεχεία, αυξάνουμε το χρόνο κατά ένα ακόμη χρονικό βήμα (dt) και αφού γνωρίζουμε τις τιμές στο σύνολο του πεδίου για το χρόνο t_1 , επαναλαμβάνεται ο υπολογισμός για τη χρονική στιγμή $t_2=t_1+dt$. Δηλαδή υπολογίζονται οι τιμές t_{i+1} από t_i κ.ο.κ.

Δ.7.18. Διασπορά ρύπων - ποιότητα υδάτων

Επίλυση εξισώσεων μονοδιάστατης μεταφοράς αποδομήσιμου ρύπου

Στην περίπτωση μονοδιάστατης ροής, όπως συμβαίνει για παράδειγμα στην περίπτωση ποταμών, οι εξισώσεις μεταφοράς αποδομήσιμου ρύπου και της αντίστοιχης μεταβολής διαλυμένου οξυγόνου απλοποιούνται σημαντικά:

$$\begin{cases} \frac{\partial c_p}{\partial t} + U \frac{\partial c_p}{\partial x} = K_H \frac{\partial^2 c_p}{\partial x^2} - K_1 \cdot c_p \pm K_3 \cdot c_p \\ \frac{\partial DO}{\partial t} + U \frac{\partial DO}{\partial x} = K_H \frac{\partial^2 DO}{\partial x^2} + K_2 (DO_{SAT} - DO) - K_1 \cdot c_p + P(dt) \end{cases}$$

όπου U είναι η μέση ταχύτητα ροής κατά τον άξονα του ποταμού. Σημειώνεται ότι προστέθηκε όρος απώλειας-πηγής ρύπου λόγω «καθίζησης», ο οποίος, όπως προαναφέρθηκε, δεν έχει φυσική σημασία στην περίπτωση διαλύματος. Ο λόγος για την προσθήκη είναι για την έμμεση εκτίμηση της κάθετης ροής, η οποία δεν μπορεί να προσομοιωθεί άμεσα σε ένα μονοδιάστατο μοντέλο. Έτσι εισάγεται ο όρος $\pm K_3 \cdot c_p$ που εκφράζει την απώλεια (αρνητικό πρόσημο) ή προσθήκη (θετικό πρόσημο) συγκεντρώσεων ρύπου λόγω κατακόρυφης ροής.

Οι τιμές του συντελεστή είναι της τάξης του 10^{-5} με 10^{-6} s^{-1} .

Δ.7.18. Διασπορά ρύπων - ποιότητα υδάτων

Επίλυση εξισώσεων μονοδιάστατης μεταφοράς αποδομήσιμου ρύπου

Οι εξισώσεις αυτές επιλύονται με τη χρήση αριθμητικών μεθόδων, μπορούν όμως να επιλυθούν και αναλυτικά. Έτσι, θεωρώντας αμελητέα την επίδραση της διάχυσης, της φωτοσύνθεσης και της «καθίζησης», οι εξισώσεις απλοποιούνται στις:

$$\begin{cases} \frac{\partial c_p}{\partial t} + U \frac{\partial c_p}{\partial x} = -K_1 \cdot c_p \\ \frac{\partial DO}{\partial t} + U \frac{\partial DO}{\partial x} = K_2 (DO_{SAT} - DO) - K_1 \cdot c_p \end{cases}$$

$$\begin{cases} c_p(x) = c_{p0} \cdot \exp\left(-K_1 \frac{x}{U}\right) \\ DO(x) = DO_{SAT} - \frac{K_1 \cdot c_{p0}}{K_2 - K_1} \left[\exp\left(-K_1 \frac{x}{U}\right) - \exp\left(-K_2 \frac{x}{U}\right) \right] - (DO_{SAT} - DO_0) \cdot \exp\left(-K_2 \frac{x}{U}\right) \end{cases}$$

όπου $c_p(\mathbf{x})$ είναι η μεταβολή της κατανάλωσης οξυγόνου (oxygen consumption) και DO_0 και c_{p0} είναι η κατανάλωση οξυγόνου και η συγκέντρωση βιολογικά απαιτούμενου οξυγόνου στη θέση εισόδου του ρύπου στη ροή ($x=0$), αντίστοιχα. Σημειώνεται ότι ο όρος x/U ισούται με το χρόνο που απαιτείται για να φτάσει ο ρύπος στη θέση x στην περίπτωση που η μέση ροή στη διατομή είναι U . Συχνά αναφέρεται και ως 'χρόνος διαδρομής'.

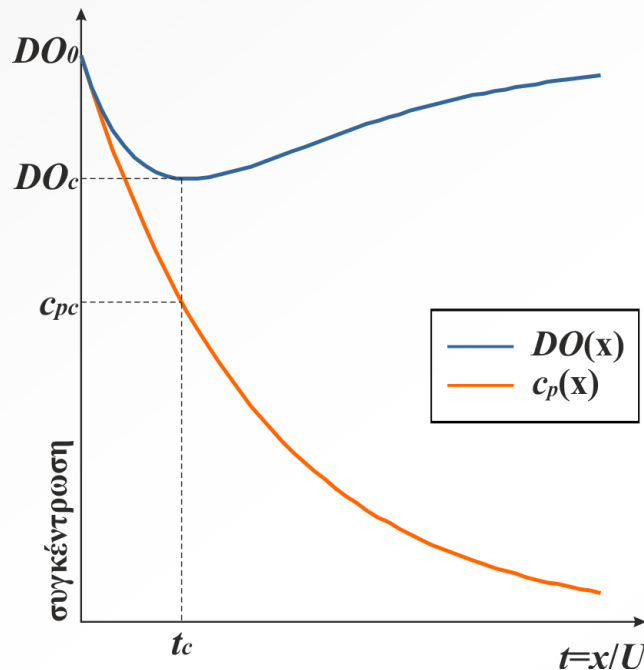
Δ.7.18. Διασπορά ρύπων - ποιότητα υδάτων

Εικόνες

Η γραφική παράσταση της συγκέντρωσης διαλυμένου οξυγόνου και ρύπου σε σχέση με το χρόνο διαδρομής δίνεται στο παρακάτω σχήμα (Σχήμα). Η μορφή του διαλυμένου οξυγόνου μειώνεται αρχικά, λόγω της κατανάλωσης για την αποδόμηση του ρύπου, φτάνει ένα τοπικό ελάχιστο και, στη συνέχεια αυξάνει λόγω αναέρωσης. Η κρίσιμη (ελάχιστη) τιμή διαλυμένου οξυγόνου, DO_c , και η αντίστοιχη χρονική στιγμή στην οποία παρατηρείται, t_c , δίνονται από τη σχέση:

$$DO_c = DO_{SAT} - \frac{K_1}{K_2} \cdot c_{p0} \cdot \exp(-K_1 \cdot t_c)$$

$$t_c = \frac{1}{K_2 - K_1} \cdot \ln\left(\frac{K_2}{K_1}\right) \cdot \left[1 - \frac{(DO_{SAT} - DO_0) \cdot (K_2 - K_1)}{c_{p0} \cdot K_1}\right]$$



Σχήμα Μεταβολή συγκέντρωσης οξυγόνου (μπλε καμπύλη) και βιολογικώς απαιτούμενου οξυγόνου (πορτοκαλί καμπύλη) με το χρόνο. Στο γράφημα σημειώνονται οι αντίστοιχες κρίσιμες τιμές.

Δ.7.18. Διασπορά ρύπων - ποιότητα υδάτων

Βίντεο

Φουκουσίμα - ραδιενεργός μόλυνση λόγω οριζόντιας διασποράς στον Ειρηνικό Ωκεανό

Fukushima - radioactive contamination / dispersion in the Pacific Ocean

<https://www.youtube.com/watch?v=j7UQXfN-J4E>

<https://www.youtube.com/watch?v=EzW2owG1ql4>

Πλαστικά απορρίμματα στον παγκόσμιο ωκεανό

Plastic waste in the ocean

<https://www.dkrz.de/communication/galerie/Vis/ozean/garbage>

Δ.7.19. Διασπορά σε Ποταμούς

Εικόνες διασποράς σε 1-D και 2-D ροές



Δ.7.19. Διασπορά σε Ποταμούς

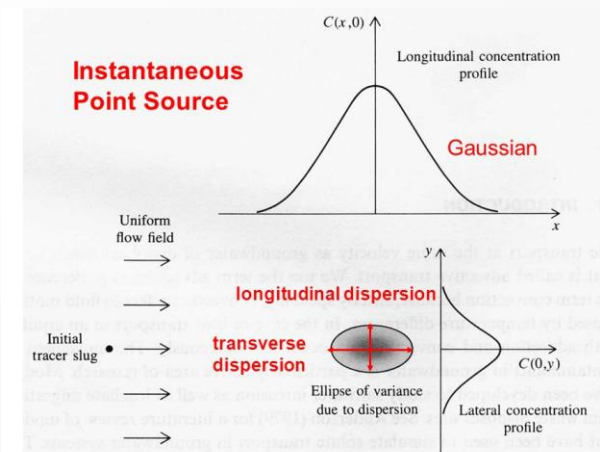
Η σημασία της διασποράς σε 1-D και 2-D ροές

Η αξιολόγηση του συντελεστή διασποράς E είναι ακόμα **αμφιλεγόμενη**, διότι **δεν μπορεί να μετρηθεί άμεσα**, αλλά μπορεί να εκτιμηθεί μόνο μετά την εφαρμογή μαθηματικών εκφράσεων, οι οποίες σχετίζονται με γνωστούς όρους που θα μπορούσαν να μετρηθούν.

Θεωρητικά, ο ορθός τρόπος αξιολόγησής του E θα πρέπει να είναι η εφαρμογή εξισώσεων μεταφοράς ρυπαντικού φορτίου με όλοι τους εμπλεκόμενους όροι γνωστούς, εκτός του E , το οποίο καθίσταται ο μοναδικός άγνωστος του προβλήματος και συνεπώς μια ρυθμιστική παράμετρος βαθμονόμησης. Στην πράξη, υπάρχουν διάφοροι λόγοι αβεβαιότητας υπολογισμού του E , λόγω των πραγματικών τυρβωδών συνθηκών του ποταμού και, κατά συνέπεια, υπάρχει πάντα η ανάγκη υιοθέτησης εμπειρικών προσαρμογών.

Οπότε χρησιμοποιούνται παραδείγματα από τη Βιβλιογραφία και ιστορικά δεδομένα στις διάφορες περιοχές μελέτης ή ένας ακόμα πιο δύσκολος τρόπος αντιμετώπισης είναι να χρησιμοποιούνται συγκρίσιμες τιμές του E , οι οποίες λαμβάνονται από διαφορετικές περιπτώσεις εφαρμογής και ίσως χρησιμοποιώντας διαφορετικά εργαλεία.

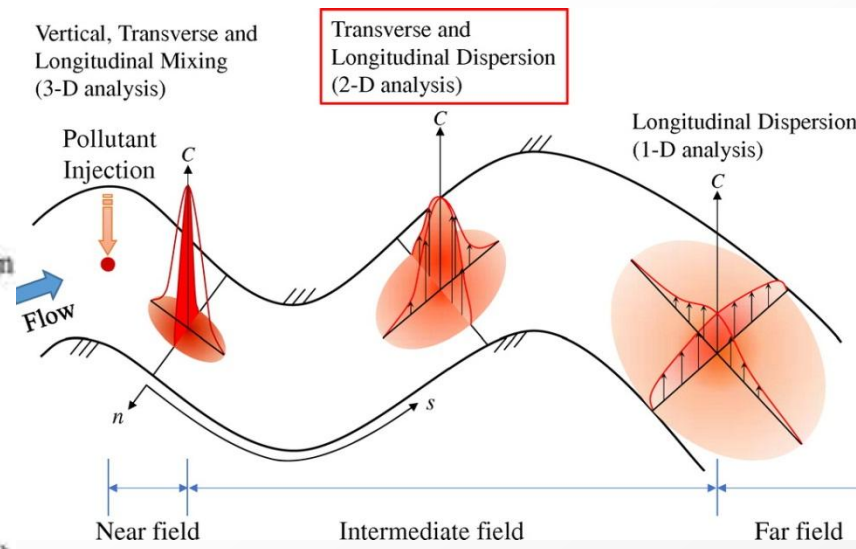
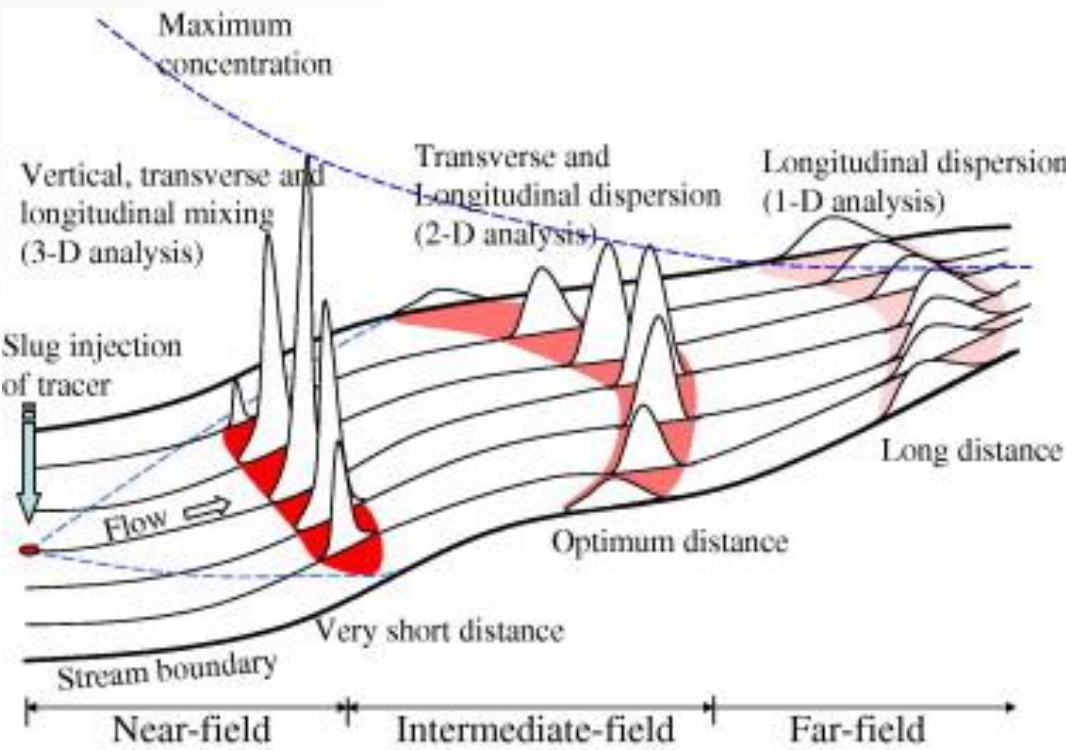
Η εγγενής φύση των φαινομένων διασποράς απαιτεί, πρώτα απ' όλα, να **χωριστεί ο συντελεστής διασποράς E σε δύο συνιστώσες**, τον **συντελεστή διαμήκου διασποράς E_L** και τον **συντελεστή εγκάρσιας διασποράς E_{tr}**



Δ.7.19. Διασπορά σε Ποταμούς και Ρυάκια

Η σημασία της διασποράς σε 1-D και 2-D ροές

Η διαμήκης διασπορά, δρα προς την κατεύθυνση της ροής του νερού κατά μήκος του ποταμού, ενώ η εγκάρσια διασπορά λαμβάνει χώρα στην εγκάρσια διεύθυνση από αυτή της κύριας ροής, τόσο οριζόντια όσο και κατακόρυφα. Σε ποταμούς, γενικά η διαμήκης διασπορά κυριαρχεί της εγκάρσιας διασποράς, η οποία είναι σημαντική μόνο στην περίπτωση ενός «απλώματος» του ρου του ποταμού όπου και παρατηρούνται χαμηλές ταχύτητες ροής στα κατόντη.

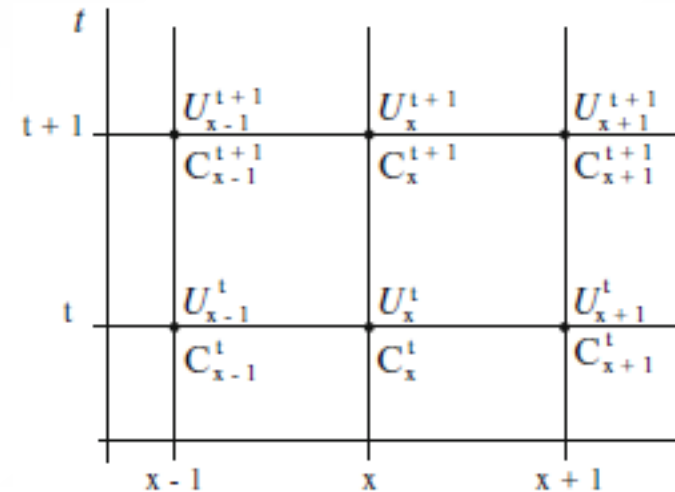


Δ.7.20. Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών

Βασικές έννοιες της προσέγγισης αριθμητικών επιλύσεων

If Δt is the interval between the two time instants and Δx is the distance between the two cross sections at the $x - 1$ and x location and between x and $x + 1$, the partial derivative of concentration with respect to time can be written as

$$\frac{\partial C}{\partial t} \rightarrow \frac{1}{\Delta t} \left[\frac{C_x^{t+1} + C_{x+1}^{t+1}}{2} - \frac{C_x^t + C_{x+1}^t}{2} \right] \quad (12.4)$$



For the advection process, the entering mass through the cross section at $x - 1$ can be put as

$$\frac{C_x^t U_x^t + C_{x+1}^{t+1} U_x^{t+1}}{2}$$

$$\frac{C_{x+1}^t U_{x+1}^t + C_{x+1}^{t+1} U_{x+1}^{t+1}}{2}$$

The advection term, with the proper sign, is therefore

$$-\frac{\partial CU}{\partial x} \rightarrow \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{C_x^t U_x^t + C_{x+1}^{t+1} U_x^{t+1}}{2} - \frac{C_{x+1}^t U_{x+1}^t + C_{x+1}^{t+1} U_{x+1}^{t+1}}{2} \right] \quad (12.5)$$

Δ.7.20. Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών

Αριθμητικά Σχήματα – Κριτήρια ευστάθειας (Courant, Péclet, Diffusion)

$$C_{ou} = \frac{U\Delta t}{\Delta x} \quad (12.10)$$

is known as *Courant number*; generally, for stability, it should be

$$C_{ou} \leq 1 \quad (12.11)$$

The above condition is known as *Courant-Friedrichs-Lewy condition* (CFL condition).

These concepts are summarised in the *Péclet number*

$$Pe = \frac{U\Delta x}{E}$$

Για ευστάθεια στην επίλυση :

More accurate analyses have focussed on the interaction between the geometrical terms and the physical aspects of the problem. Another dimensionless term has been identified, namely, the *diffusion number*

$$\Lambda = \frac{E\Delta t}{\Delta x^2} \quad (12.13)$$

Αριθμός Péclet προσομοίωσης =

Λόγος Μεταφοράς / Διασποράς < 2

Αριθμός Διάχυσης προσομοίωσης = pointing out that the solution stability means that the errors should not be amplified as far as the computation proceeds. To avoid such an event, a simple empirical rule suggests that Λ should be less than 0.2.

Λόγος Διασποράς / Αριθμ. Διάχυση

Δ.7.20. Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών

Οριακές Συνθήκες

1) Τύπου Dirichlet

Such a situation, in which the computed variables are directly determined, interprets the *Dirichlet rule* and can be expressed as

$$C(\infty, \infty) = C_0 \quad (12.14)$$

or, better

$$C(m, n) = C_0 \quad (12.15)$$

with both m and n sufficiently high as to allow the saturation to be reached.

2) Τύπου Neumann

pollutant transport, particularly the reaction. This case, where the variables are determined by a known derivative, is known as *Neumann rule*. The final downstream condition is in the form

$$\frac{\partial C}{\partial t} = 0 \quad \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (12.16)$$

and practically

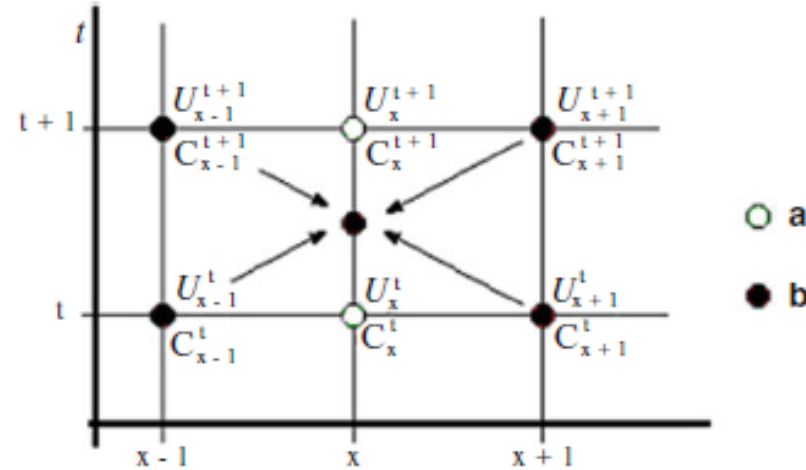
$$C(m, n) = C(m - 1, n - 1) \quad (12.17)$$

with m and n sufficiently high.

Δ.7.21. Αριθμητικά Σχήματα

Crank-Nicolson – Κεντρικές Διαφορές στο Χρόνο και το Χώρο (Πεπλεγμένο – Άρρητο Σχήμα)

Centered Time Centered Space (CTCS)



$$\frac{\partial C}{\partial x} \rightarrow \frac{\frac{C_{x+1}^{t+1} - C_{x-1}^{t+1}}{2\Delta x} + \frac{C_{x+1}^t - C_{x-1}^t}{2\Delta x}}{2}$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \rightarrow \frac{\frac{C_{x+1}^t - 2C_x^t + C_{x-1}^t}{\Delta x^2} + \frac{C_{x+1}^{t+1} - 2C_x^{t+1} + C_{x-1}^{t+1}}{\Delta x^2}}{2}$$

Fig. 12.3 The simplified grid of the Crank-Nicolson scheme: points a contain the time derivative and the second space derivative, while points b contain both first and second space derivatives

$$\begin{aligned} & \frac{C_x^t - C_x^{t+1}}{\Delta t} - \frac{U}{4\Delta x} (C_{x+1}^{t+1} - C_{x-1}^{t+1} + C_{x+1}^t - C_{x-1}^t) \\ & + \frac{E}{2\Delta x^2} [C_{x+1}^t + C_{x-1}^{t+1} - 2(C_x^t + C_x^{t+1}) + C_{x-1}^t + C_{x-1}^{t+1}] - \frac{k}{2} (C_x^t + C_x^{t+1}) = 0 \end{aligned}$$

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^{n-1}}{2\Delta t} + U \frac{c_{j+1}^n - c_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0$$

$$c_j^{n+1} = c_j^{n-1} - \frac{U\Delta t}{\Delta x} (c_{j+1}^n - c_{j-1}^n)$$

Δ.7.21. Αριθμητικά Σχήματα

Backward Time Centered Space (BTCS) (Άρρητο Σχήμα – Σύστημα Εξισώσεων - Ευσταθές)

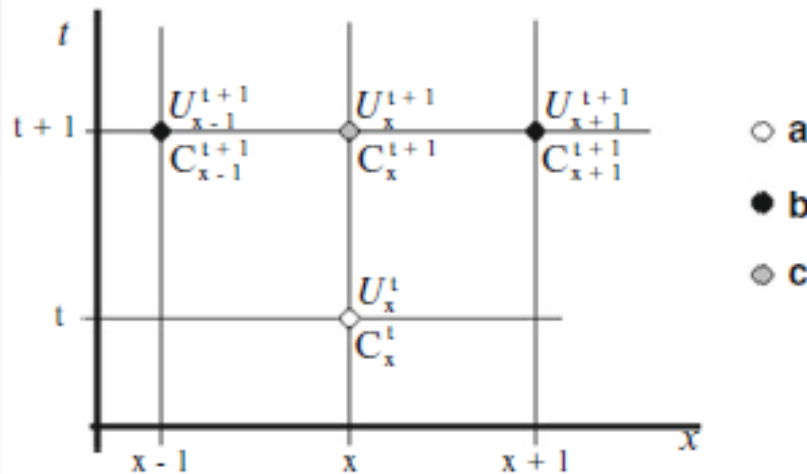


Fig. 12.4 A first case of four-point scheme: BTCS. Point **a** concerns only time, points **b** are related to space and point **c** concerns both time and space

$$\frac{\partial C}{\partial t} \rightarrow \frac{C_x^{t+1} - C_x^t}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} \rightarrow \frac{C_{x+1}^{t+1} - C_{x-1}^{t+1}}{2\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \rightarrow \frac{C_{x+1}^{t+1} - 2C_x^{t+1} + C_{x-1}^{t+1}}{\Delta x^2}$$

$$\frac{C_x^{t+1} - C_x^t}{\Delta t} + \frac{U}{2\Delta x} (C_{x+1}^{t+1} - C_{x-1}^{t+1}) - \frac{E}{\Delta x^2} (C_{x+1}^{t+1} - 2C_x^{t+1} + C_{x-1}^{t+1}) + kC_x^{t+1} = 0$$

$$-\frac{C_x^t}{\Delta t} + \alpha_1 C_x^{t+1} + \alpha_2 C_{x+1}^{t+1} + \alpha_3 C_{x-1}^{t+1} = 0$$

$$\frac{\varphi_j^{n+1} - \varphi_j^n}{\Delta t} + c \frac{\varphi_{j+1}^{n+1} - \varphi_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x} = 0$$

Δ.7.21. Αριθμητικά Σχήματα

Ρητά αριθμητικά σχήματα

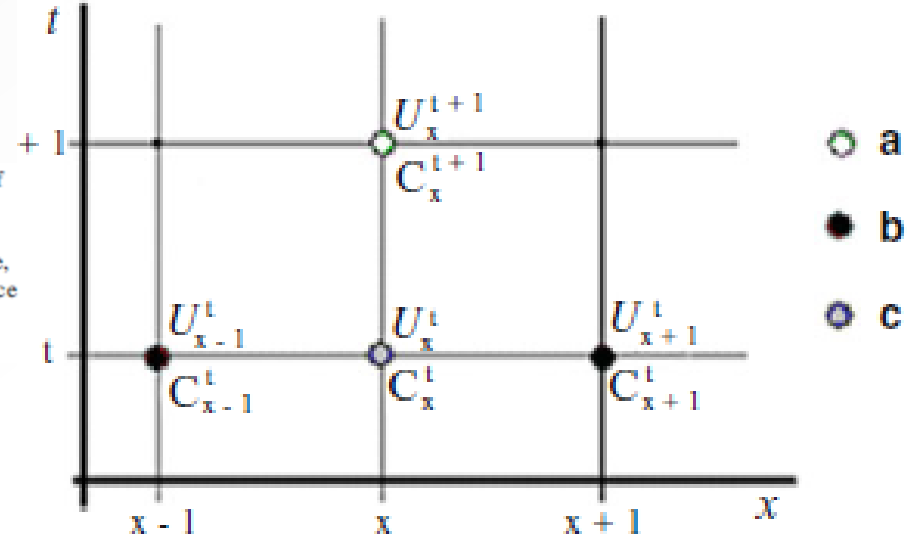
Forward Time Centered Space (FTCS)

$$\frac{\partial C}{\partial t} \rightarrow \frac{C_x^{n+1} - C_x^n}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} \rightarrow \frac{C_{x+1}^n - C_{x-1}^n}{2\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \rightarrow \frac{C_{x+1}^n - 2C_x^n + C_{x-1}^n}{\Delta x^2}$$

Fig. 12.7 Another case of four-point scheme: FTCS. Like in the previous case, point a concerns only time, points b are related to space and point c concerns both time and space



$$\frac{C_x^n - C_x^{n+1}}{\Delta t} + \frac{U}{2\Delta x} (C_{x+1}^n - C_{x-1}^n) - \frac{E}{\Delta x^2} (C_{x+1}^n - 2C_x^n + C_{x-1}^n) + kC_x^n = 0$$

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} + U \frac{c_{j+1}^n - c_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0$$

$$c_j^{n+1} = c_j^n - \frac{U \Delta t}{2\Delta x} (c_{j+1}^n - c_{j-1}^n)$$

Δ.7.21. Αριθμητικά Σχήματα

Ρητά αριθμητικά σχήματα

Forward Time Backward Space (FTBS)

$$\frac{\varphi_j^{n+1} - \varphi_j^n}{\Delta t} + c \frac{\varphi_j^n - \varphi_{j-1}^n}{\Delta x} = 0$$

$$\frac{c \cdot \Delta t}{\Delta x} \leq 1$$

Σχήμα Εμπρόσθιων Διαφορών

$$\frac{C_x^{t+1} - C_x^t}{\Delta t} + \frac{U}{\Delta x} (C_x^t - C_{x-1}^t) - \frac{E}{\Delta x^2} (C_{x+1}^t - 2C_x^t + C_{x-1}^t) + kC_x^t = 0$$

As proposed by Fletcher (1990), the stability criterion is

$$\frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{2E\Delta t}{\Delta x^2} \leq 1$$

and for achieving accuracy, it is necessary that

$$\frac{U\Delta t}{\Delta x} \ll \frac{2\Delta x}{\Delta x - U\Delta t} \quad (12.40)$$

Lax-Wendroff

$$\frac{C_x^{t+1} - C_x^t}{\Delta t} + \frac{U}{2\Delta x} (C_{x+1}^t - C_{x-1}^t) - \frac{(E + 0.5U^2\Delta t)}{\Delta x^2} (C_{x+1}^t - 2C_x^t + C_{x-1}^t) + kC_x^t = 0 \quad (12.41)$$

and the relevant stability criterion is (Fletcher 1990)

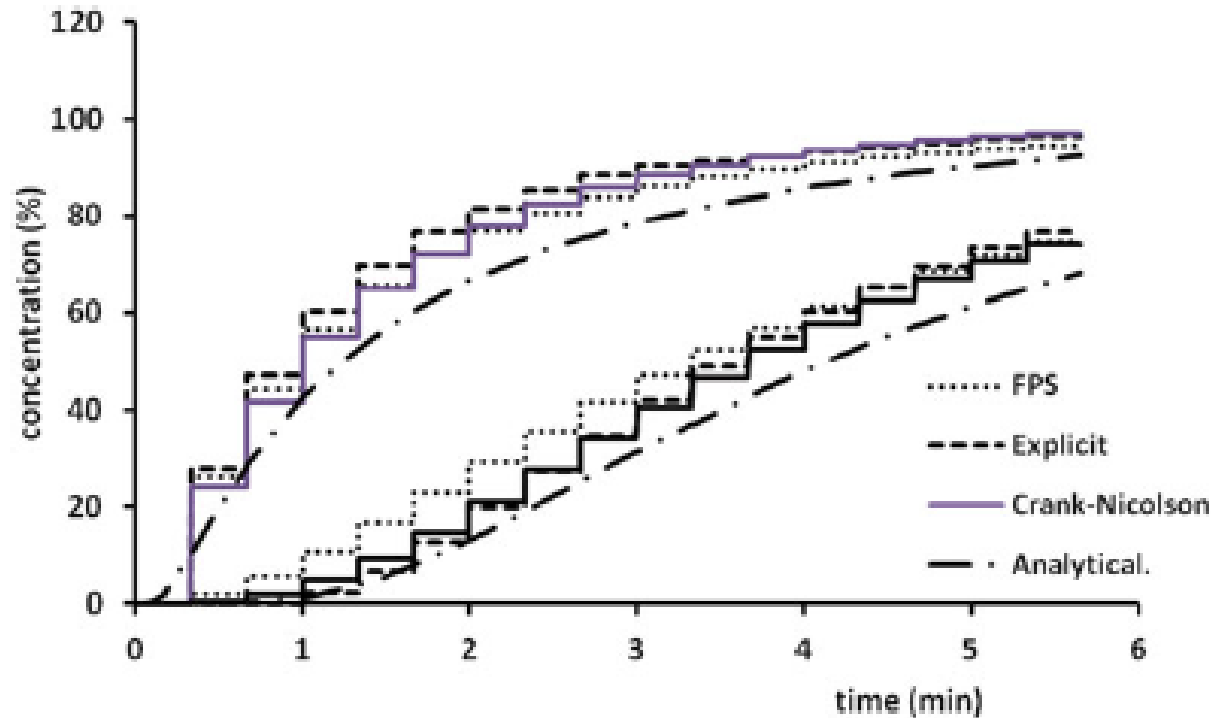
$$0 \leq \left(\frac{U\Delta t}{\Delta x} \right)^2 \leq \frac{2E\Delta t + (U\Delta t)^2}{\Delta x^2} \leq 1 \quad (12.42)$$

Δ.7.21. Αριθμητικά Σχήματα

Τελικά σχόλια για Μέθοδο Πεπερασμένων Διαφορών

Όπως έγινε φανερό από τα παραπάνω, μια **διαφορική εξίσωση μπορεί να γραφεί** με τη **χρήση πεπερασμένων διαφορών**, ώστε να μπορέσει να επιλυθεί αριθμητικά. Η σύγκλιση σε κατάσταση ευστάθειας (steady state) και η προσέγγιση της αναλυτικής λύσης επιτυγχάνεται στο χρόνο, οπότε υπάρχει ένα αρχικό χρονικό διάστημα «προθέρμανσης» της αριθμητικής επίλυσης (warm-up period).

Κανόνας $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0 \Rightarrow$ ελαχιστοποίηση σφαλμάτων, μεγιστοποίηση ακρίβειας επίλυσης, \uparrow υπολογιστικού χρόνου και φόρτου. Οπότε πρέπει εν τέλει να επιτυγχάνεται ένας προσιτός συμβιβασμός επιλογής Δx και Δt .



Δ.7.21. Αριθμητικά Σχήματα

Τελικά σχόλια για Μέθοδο Πεπερασμένων Διαφορών

Πλεονεκτήματα ρητών σχημάτων

λιγότερο περίπλοκοι αλγόριθμοι και ταχύτερη εφαρμογή επαναλήψεων

Μειονεκτήματα – Πλεονεκτήματα άρρητων σχημάτων

Αργή διαδικασία επαναλήψεων, η μη ύπαρξη κριτηρίου σταθερότητας επιτρέπει μεγάλες τιμές για Δt και επομένως λιγότερο υπολογιστικό χρόνο (πιο γρήγορες προσομοιώσεις)

Γενικά, η FDM απαιτεί ένα πλέγμα σταθερών και ομοιόμορφων μεγεθών, σε όλο το υπολογιστικό πεδίο. Ωστόσο, το κύριο μειονέκτημα της είναι η απαίτηση ορθογώνιου υπολογιστικού καννάβου. Αυτό μπορεί να αυξήσει τον αριθμό των βημάτων και να απαιτήσει περισσότερο υπολογιστικό χρόνο, διότι όλα τα μέρη του υδάτινου σώματος θα πρέπει να αντιμετωπίζονται με τον ίδιο τρόπο, ακόμη και εκείνα στα οποία λαμβάνουν χώρα διεργασίες που απαιτούν λιγότερη χωρο-χρονική ανάλυση. Η FDM είναι μακράν η απλούστερη αριθμητική μέθοδος για την ανάπτυξη αλγόριθμων, ειδικά σε μοντέλα 1-D και 2-D. Είναι εξαιρετικά ταχύτερη σε πολλές περιπτώσεις ροών σε σύγκριση με άλλες μεθόδους, και είναι ιδιαίτερα εύχρηστη σε πρακτικά προβλήματα ποιότητας νερών.

Δ.7.22. Αριθμητική μέθοδος Tracer-2D

Η χρήση πεπερασμένων διαφορών στην αριθμητική επίλυση προβλημάτων

Όπως έγινε φανερό από τα παραπάνω, μια **διαφορική εξίσωση μπορεί να γραφεί** με τη χρήση **πεπερασμένων διαφορών**, ώστε να μπορέσει να επιλυθεί αριθμητικά. Πιο συγκεκριμένα, μια εξίσωση μπορεί να περιλαμβάνει 1, 2, 3 ή και 4 μεταβλητές:

Διαφορική εξίσωση μίας μεταβλητής

Πρόκειται για συναρτήσεις με μία μόνο μεταβλητή που μπορεί να είναι ο χρόνος $f(t)$ ή κάποια διάσταση του χώρου $f(x)$ ή $f(y)$ ή $f(z)$ π.χ. εξίσωση εκθετικής μείωσης συγκέντρωσης με το χρόνο, $C(t)$, έχουμε:

$$C(t) = C_0 \cdot \exp(\lambda \cdot t) \Rightarrow \frac{dC}{dt} = \lambda \cdot C_0 \cdot \exp(\lambda \cdot t)$$

όπου C_0 η αρχική συγκέντρωση και λ ($\lambda < 0$) ο ρυθμός μείωσης της συγκέντρωσης (π.χ. ρυθμός βιοαποδόμησης).

Γράφοντας την παραπάνω εξίσωση με μορφή εμπρόσθιων πεπερασμένων διαφορών και επιλύοντας ως προς το επόμενο χρονικό βήμα ($n+1$) έχουμε:

$$\frac{C_{n+1} - C_n}{\Delta t} = \lambda \cdot C_0 \cdot \exp(\lambda \cdot t) \Rightarrow C_{n+1} = C_n + \lambda \cdot C_0 \cdot \exp(\lambda \cdot t) \cdot \Delta t$$

Από τη σχέση αυτή είναι δυνατός ο προσδιορισμός της τιμής της παραμέτρου σε όλα τα χρονικά βήματα που επιλέγονται, από την τιμή της στο πρώτο χρονικό βήμα (C_0 , **αρχικές συνθήκες**). Στο ε'πόμενο σχήμα δίνονται τα αποτελέσματα της εφαρμογής της εξίσωσης για δύο διαφορετικά βήματα χρονικής διακριτοποίησης, όπου μπορεί να παρατηρηθεί ότι η επιλογή μικρότερου βήματος βελτιώνει κατά πολύ τη σύγκλιση με την αναλυτική λύση.

Δ.7.22. Αριθμητική μέθοδος Tracer-2D

Διαφορική εξίσωση πολλών μεταβλητών

Διαφορική εξίσωση 2 μεταβλητών:

Παίρνοντας ως παράδειγμα τη μεταβολή της συγκέντρωσης μιας συντηρητικής ουσίας στο μονοδιάστατο χώρο και το χρόνο $C(x,t)$, ή αλλιώς εξίσωση μεταφοράς, αυτή γράφεται:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0$$

Πρόκειται για μια γραμμική, υπερβολική εξίσωση 1^{ης} τάξης με λύση $C(x+U \cdot t) = \text{σταθερό} = C_0$, δηλαδή η αρχική συγκέντρωση C_0 μεταφέρεται κατά x με ταχύτητα U . Επιλύοντας τη σχέση αυτή με εφαρμογή εμπρόσθιας διαφοράς για τη χρονική παράγωγο και οπίσθιας διαφοράς για τη χωρική παράγωγο έχουμε:

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} + U \frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{\Delta x} = 0 \Rightarrow C_i^{n+1} = C_i^n - \frac{U \cdot \Delta t}{\Delta x} (C_i^n - C_{i-1}^n)$$

Έπεται ότι η συγκέντρωση σε μια θέση i ($x = x_i = i \cdot \Delta x$) τη χρονική στιγμή $n+1$ ($t = t_{n+1} = (n+1) \cdot \Delta t$) θα είναι ίση με την τιμή που θα είχε σημείο (α) που απέχει απόσταση ανάντη του i ίση με $U \cdot \Delta t$ το προηγούμενο χρονικό βήμα (n), όπως εικονίζεται στο επόμενο σχήμα. Έτσι, ουσιαστικά κατά την επίλυση της εξίσωσης πραγματοποιείται γραμμική παρεμβολή μεταξύ των τιμών C_{i-1}^n και C_i^n σε απόσταση α από το i και η τιμή αυτή τίθεται στο C_i^{n+1} . Έτσι, στην περίπτωση που ο λόγος $U \cdot \Delta t / \Delta x$ δεν ισούται με τη μονάδα, εισάγεται στην επίλυση σφάλμα e (Σχήμα) λόγω αριθμητικής διάχυσης με συντελεστή $\sigma = U \cdot \Delta x / 2$.

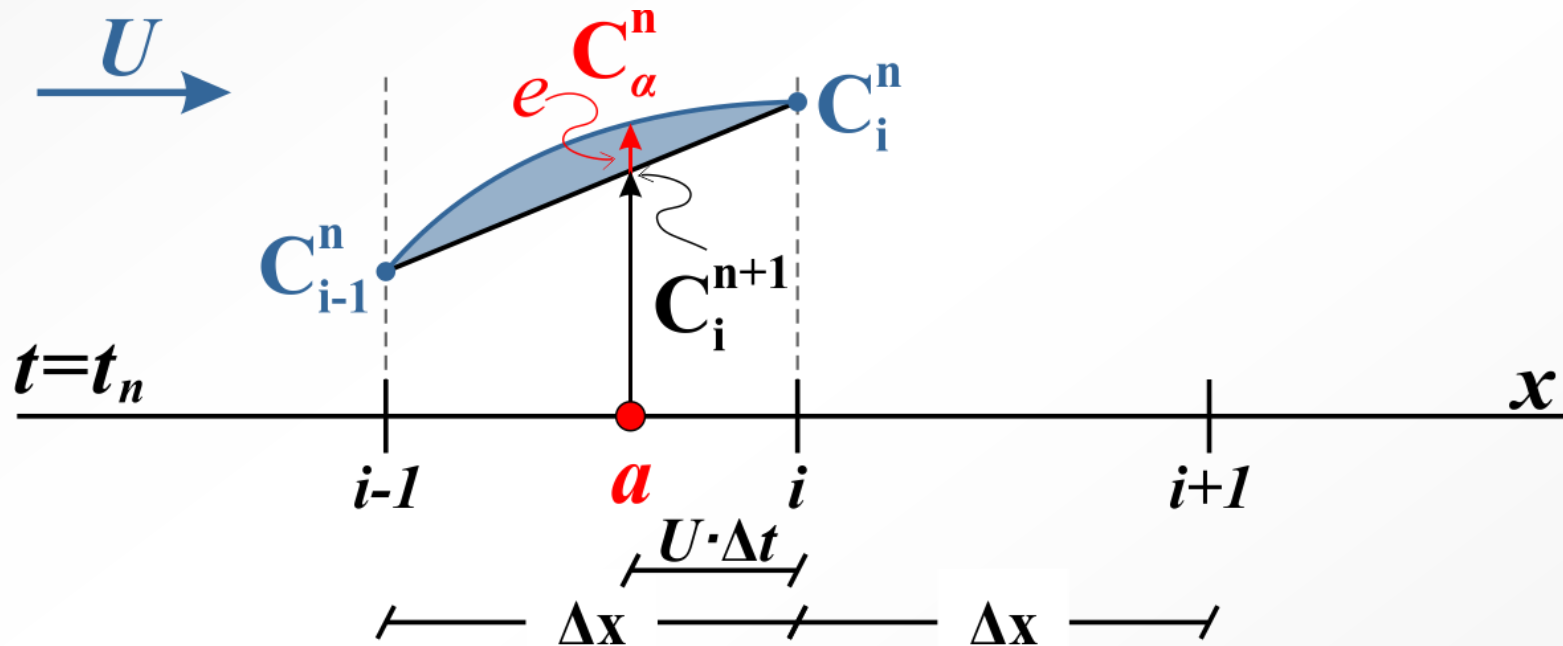
Γίνεται, επομένως, φανερό ότι κατά τη μοντελοποίηση των φυσικών διεργασιών παίζουν σημαντικό ρόλο τόσο η χρονική, όσο και η χωρική διακριτοποίηση, αλλά και το σχήμα πεπερασμένων διαφορών που εφαρμόζονται.

Δ.7.22. Αριθμητική μέθοδος Tracer-2D

Διαφορική εξίσωση πολλών μεταβλητών

Διαφορική εξίσωση 2 μεταβλητών:

Προσδιορισμός της τιμής της συγκέντρωσης στη θέση i στο επόμενο χρονικό βήμα $n+1$ από τις τιμές της παραμέτρου στις θέσεις $i-1$ και i κατά το προηγούμενο χρονικό βήμα n .



Δ.7.22. Αριθμητική μέθοδος Tracer-2D

Διαφορική εξίσωση πολλών μεταβλητών

Διαφορική εξίσωση 3 μεταβλητών:

Τέτοιες εξισώσεις περιγράφουν την εξέλιξη μιας παραμέτρου στο δισδιάστατο πεδίο, επομένως οι μεταβλητές που περιλαμβάνουν είναι ο χρόνος t και οι δύο χωρικές διαστάσεις x και y . Ανάγοντας την παραπάνω εξίσωση μεταφοράς στο δισδιάστατο πεδίο, θεωρώντας ταχύτητες μεταφοράς U και V κατά τις διευθύνσεις x και y , αντίστοιχα και εφαρμόζοντας εμπρόσθια διαφορά για τη χρονική παράγωγο και οπίσθια διαφορά για τις χωρικές παραγώγους έχουμε:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} = 0 \Rightarrow \frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t} + U \frac{C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n}{\Delta x} + V \frac{C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n}{\Delta y} = 0 \Rightarrow$$

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^n - \frac{U \cdot \Delta t}{\Delta x} (C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n) - \frac{V \cdot \Delta t}{\Delta y} (C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n)$$

Στις παραπάνω εξισώσεις ο δείκτης i αναφέρεται στη διάσταση x και ο δείκτης j στη διάσταση y . Δηλαδή, σε ένα δισδιάστατο μοντέλο, οι παράμετροι του προβλήματος (στη συγκεκριμένη περίπτωση η συγκέντρωση C) είναι δισδιάστατοι πίνακες $C[i,j]$.

Θα μπορούσαμε να εκφράσουμε την κάθε παράμετρο ως τρισδιάστατο πίνακα, συμπεριλαμβάνοντας και τη μεταβλητή του χρόνου, αλλά κάτι τέτοιο συνήθως αποφεύγεται για οικονομία υπολογιστικής μνήμης.

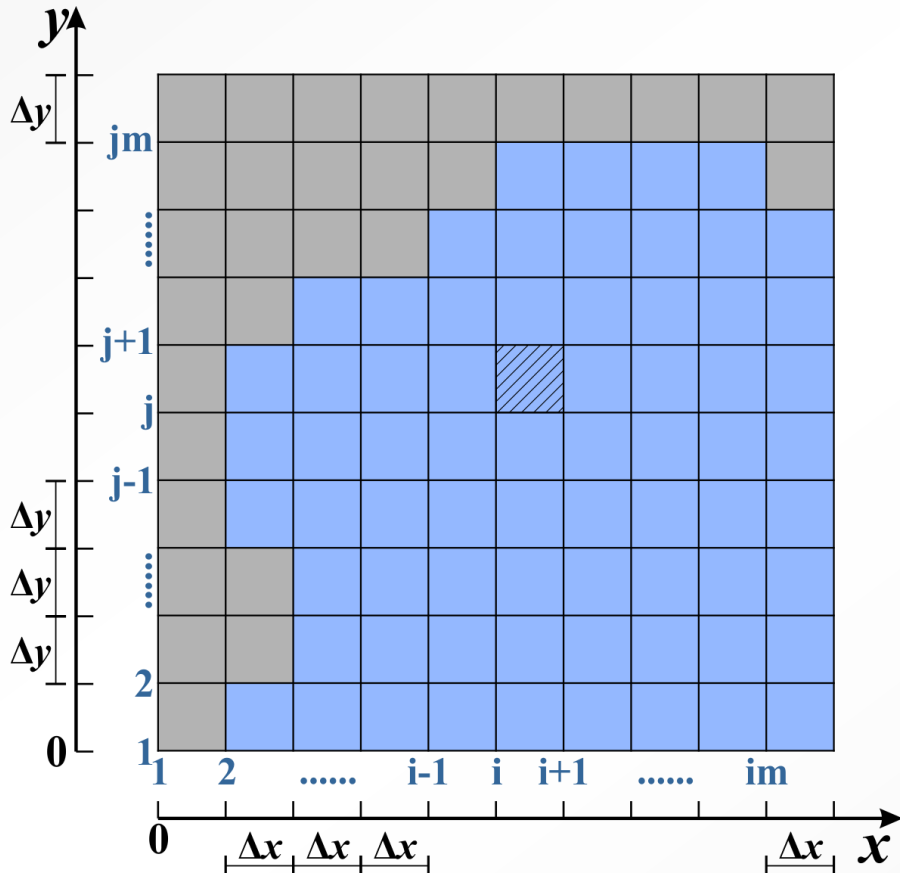
Δ.7.22. Αριθμητική μέθοδος Tracer-2D

Διαφορική εξίσωση πολλών μεταβλητών

Διαφορική εξίσωση 3 μεταβλητών:

Διακριτοποίηση ιδεατού δισδιάστατου πεδίου σε στοιχειώδη τμήματα μήκους Δx και Δy και εξαγωγή του δισδιάστατου υπολογιστικού κανάβου.

Τα κελιά με γκριζό χρώμα είναι κελιά ξηράς, ενώ το διαγραμματισμένο κελί αντιστοιχεί στους δείκτες i, j .



Δ.7.22. Αριθμητική μέθοδος Tracer-2D

Διαφορική εξίσωση πολλών μεταβλητών

Διαφορική εξίσωση 4 μεταβλητών:

Τέτοιες εξισώσεις περιγράφουν την **εξέλιξη** μιας **παραμέτρου** στο **τρισδιάστατο πεδίο**, επομένως οι μεταβλητές που περιλαμβάνουν είναι ο **χρόνος t** και οι **τρεις χωρικές διαστάσεις x, y και z** όπου **z** το **βάθος του νερού**. Ανάγοντας την παραπάνω εξίσωση μεταφοράς στο τρισδιάστατο πεδίο και θεωρώντας **οριζόντιες ταχύτητες μεταφοράς U και V** κατά τις **διευθύνσεις x και y** αντίστοιχα και **κατακόρυφη ταχύτητα W**, έχουμε:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \Rightarrow \frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^n}{\Delta t} + U \frac{C_{i,j,k}^n - C_{i-1,j,k}^n}{\Delta x} + V \frac{C_{i,j,k}^n - C_{i,j-1,k}^n}{\Delta y} + W \frac{C_{i,j,k}^n - C_{i,j,k-1}^n}{\Delta z} = 0 \Rightarrow$$

$$C_{i,j,k}^{n+1} = C_{i,j,k}^n - \frac{U \cdot \Delta t}{\Delta x} (C_{i,j,k}^n - C_{i-1,j,k}^n) - \frac{V \cdot \Delta t}{\Delta y} (C_{i,j,k}^n - C_{i,j-1,k}^n) - \frac{W \cdot \Delta t}{\Delta z} (C_{i,j,k}^n - C_{i,j,k-1}^n)$$

Στις παραπάνω εξισώσεις ο δείκτης **i** αναφέρεται στη διάσταση **x**, ο δείκτης **j** στη διάσταση **y** και ο δείκτης **k** στη διάσταση **z** (Σχήμα).

Έτσι, σε ένα τρισδιάστατο μοντέλο οι παράμετροι του προβλήματος είναι **τρισδιάστατοι πίνακες C[i,j,k]**.

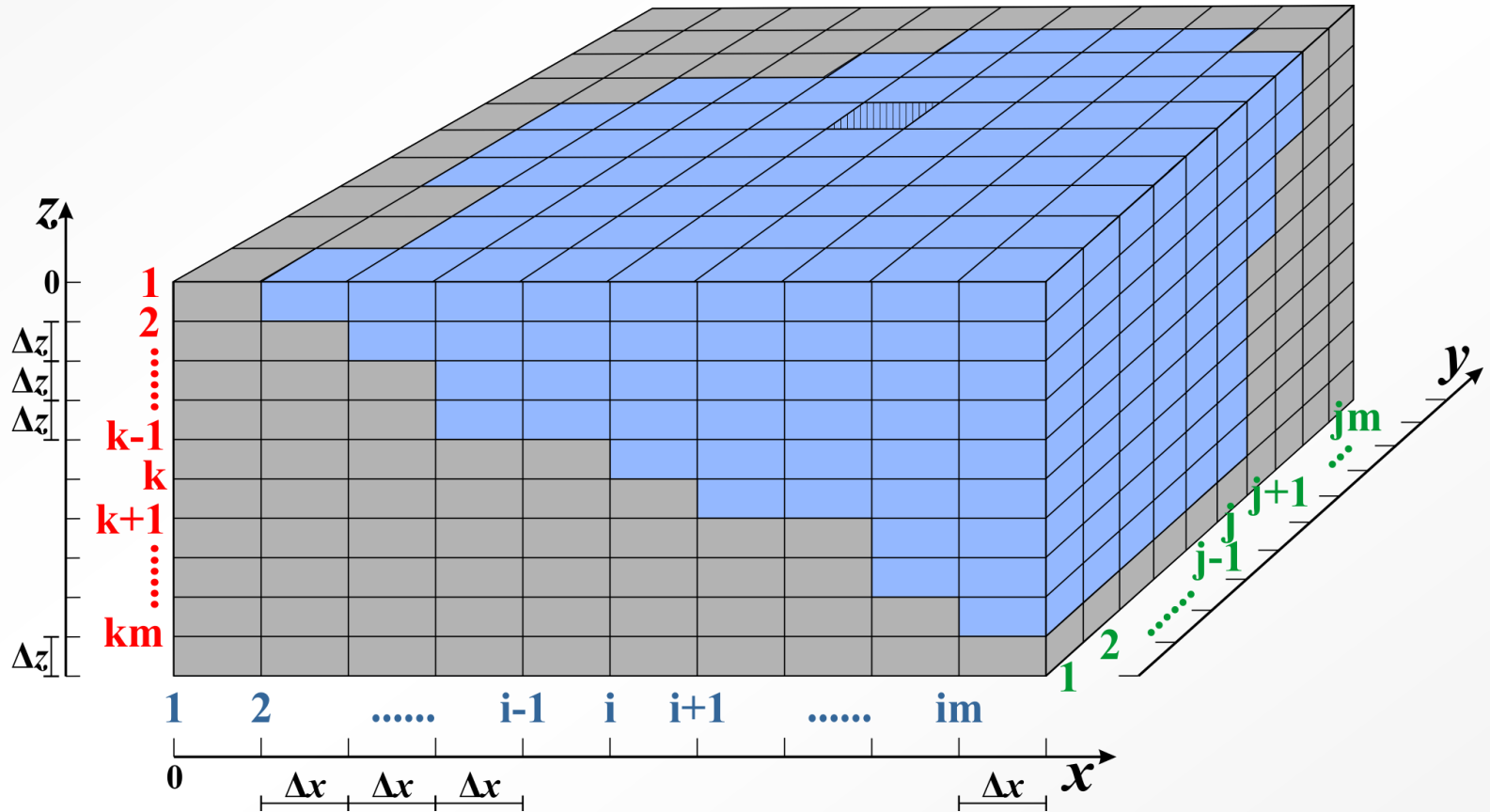
Δ.7.22. Αριθμητική μέθοδος Tracer-2D

Διαφορική εξίσωση πολλών μεταβλητών

Διαφορική εξίσωση 4 μεταβλητών:

Διακριτοποίηση ιδεατού τρισδιάστατου πεδίου σε στοιχειώδη τμήματα μήκους Δx , Δy και Δz και εξαγωγή του τρισδιάστατου υπολογιστικού κανάβου.

Τα κελιά με γκριζό χρώμα είναι κελιά ξηράς, ενώ το διαγραμματισμένο κελί αντιστοιχεί στους δείκτες $i, j, 1$.



Δ.7.23. Επίλυση αριθμητικών μεθόδων

Αρχικές και οριακές συνθήκες

Η επίλυση των διαφορικών εξισώσεων με τη χρήση κάποιας γλώσσας προγραμματισμού (π.χ. Matlab, Fortran κ.λπ.) γίνεται με **επαναληπτικούς κύκλους (loops)**, τόσο **χρονικούς**, όσο και **χωρικούς**, ώστε να καλυφθεί και το χρονικό διάστημα για το οποίο θέλουμε να κάνουμε την προσομοίωση και το σύνολο του πεδίου.

Π.χ. η απλή εξίσωση μονοδιάστατης μεταφοράς συγκέντρωσης θα γραφόταν σε γλώσσα Fortran ως εξής (θεωρώντας t_m το σύνολο των χρονικών βημάτων):

```

do t=2,tm !beginning of temporal loop
c  loop to calculate concentration, Cn, at the new time step from the values of the previous step, C
    do i=2,im !beginning of spatial loop
        Cn(i)=C(i)-U*(C(i)-C(i-1))*dt/dx
    enddo !end of spatial loop
c  set C=Cn to reset time sequence
    do i=1,im
        C (i)=Cn(i)
    enddo
enddo !end of temporal loop
    
```

Δ.7.23. Επίλυση αριθμητικών μεθόδων

Αρχικές και οριακές συνθήκες

Στο παραπάνω παράδειγμα οι δύο επαναληπτικοί κύκλοι δεν πραγματοποιούνται για το σύνολο των τιμών.

Ο χρονικός εκτελείται για $t=2, t_m$ (λείπει το βήμα $t=1$) και ο χωρικός για $i=2, i_m$ (λείπει το βήμα $i=1$). Για τον χρονικό κύκλο ο λόγος είναι ότι οι τιμές του πρώτου βήματος αποτελούν τις αρχικές συνθήκες, οι οποίες θα πρέπει να είναι γνωστές. Έτσι, πριν από την εκτέλεση του βασικού μέρους των υπολογισμών, είναι απαραίτητη η αρχικοποίηση όλων των παραμέτρων του προβλήματος. Στην περίπτωση που εξετάζουμε, θα πρέπει να οριστεί η συγκέντρωση της ουσίας κατά το πρώτο χρονικό βήμα στο σύνολο του πεδίου ($i=1, i_m$), η οποία, εάν θεωρήσουμε ότι η συγκέντρωση εισάγεται στο πεδίο στη θέση $i=2$, θα πρέπει να είναι $C(2)=C_0$ και **μηδέν στο υπόλοιπο πεδίο**, δηλαδή $C(i \neq 2)=0$.

Για τον χωρικό κύκλο δεν είναι δυνατός ο υπολογισμός της τιμής στο $i=1$, γιατί χρησιμοποιήσαμε **οπίσθια διαφορά** (η τιμή $C(i-1)$ είναι αδύνατο να υπολογιστεί για $i=1$). Έτσι, είναι απαραίτητο να οριστεί από το χρήστη η τιμή στο αριστερό όριο που αποτελεί μια από τις **οριακές συνθήκες** του **προβλήματος**. Σημειώνεται ότι στην περίπτωση που χρησιμοποιούσαμε **εμπρόσθια διαφορά** για την παράγωγο Δx , θα έπρεπε να οριστεί η τιμή της συγκέντρωσης για $i=i_m$ (ο χωρικός επαναληπτικός κύκλος θα εκτελούνταν για $i=1, i_m-1$), ενώ στην **περίπτωση κεντρικής διαφοράς** οι **οριακές συνθήκες** θα **περιλάμβαναν** τις θέσεις $i=1$ και $i=i_m$ (ο χωρικός επαναληπτικός κύκλος θα εκτελούνταν για $i=2, i_m-1$). Γράφοντας ολοκληρωμένα τον παραπάνω κώδικα, ορίζοντας πλήρως διαστάσεις πινάκων, τύπους παραμέτρων, αρχικές και οριακές συνθήκες θα είχαμε:

Δ.7.23. Επίλυση αριθμητικών μεθόδων

Αρχικές και οριακές συνθήκες

```

parameter (im=100, tm=2000)
real*8 c(im), cn(im),co,U,dx,dt,t
c definition of input parameters
co=10 !input concentration
U=0.02 !uniform velocity
dx=0.1 !spatial step
dt=dx/U !temporal step
c setting initial conditions
t=1
c(:,.)=0.0
c(2,1)=co
c main calculations
do t=2,tm !beginning of temporal loop
c loop to calculate concentration, Cn, at the new time step from the values of the previous step, C
do i=2,im !beginning of spatial loop
Cn(i)=C(i)-U*(C(i)-C(i-1))*dt/dx
enddo !end of spatial loop
c set C=Cn to reset time sequence
do i=1,im
C(i)=Cn(i)
enddo
enddo !end of temporal loop
stop
end
    
```

Δ.7.23. Επίλυση αριθμητικών μεθόδων

Κριτήρια σταθερότητας επίλυσης

Βασικό κριτήριο για τη σταθερότητα της αριθμητικής επίλυσης των διαφορικών εξισώσεων είναι τα κριτήρια **Courant–Friedrichs–Lewy (CFL)**, σύμφωνα με τα οποία θα πρέπει:

$$\begin{cases} |U_{\max}| \leq \frac{dx}{dt} \Rightarrow CFL_1 = \frac{|U_{\max}| \cdot dt}{dx} \leq 1 \\ K_H \leq \frac{1}{2} \cdot \frac{dx^2}{dt} \Rightarrow CFL_2 = \frac{K_H \cdot dt}{dx^2} \leq \frac{1}{2} \end{cases} \Rightarrow dt \leq \min \left(\frac{dx}{|U_{\max}|}, \frac{2 \cdot dx^2}{K_H} \right)$$

Η πρώτη σχέση δηλώνει ότι ο λόγος των βημάτων χωρικής και χρονικής διακριτοποίησης θα πρέπει να είναι μεγαλύτερος από το μέτρο της μέγιστης ταχύτητας ροής στο πεδίο, ενώ η δεύτερη ότι η τιμή του συντελεστή διασποράς θα πρέπει να είναι μικρότερη από το ήμισυ του λόγου επιφάνειας κελιού προς το βήμα χρόνου. Συχνά η ποσότητα CFL αναφέρεται ως **αριθμός Courant**.

Η παραβίαση των κριτηρίων CFL σε μια αριθμητική επίλυση έχει ως συνέπεια την εισαγωγή **σημαντικών σφαλμάτων** λόγω αριθμητικής διάχυσης, γεγονός που οδηγεί σε **εσφαλμένα** (erroneous) αποτελέσματα, ακόμα και σε **απειρισμό των τιμών**. Έτσι, για την αποφυγή τέτοιων σφαλμάτων **επιλέγεται τελικά το χρονικό βήμα να είναι κατά πολύ μικρότερο** από την **ελάχιστη τιμή του λόγου χρονικού βήματος προς τη μέγιστη ταχύτητα** και το **διπλάσιο του λόγου επιφάνειας κελιού προς το συντελεστή διασποράς**.

Δ.7.24. Διασπορά με μοντέλο ιχνηθέτη

Επίλυση μεταφοράς-διασποράς με μοντέλο ιχνηθέτη

Η επίλυση της εξίσωσης μεταφοράς-διασποράς με τη χρήση της μεθόδου του ιχνηθέτη στο δισδιάστατο πεδίο γίνεται με τη χρήση του μοντέλου **TracerModel2D**, το οποίο έχει γραφεί σε γλώσσα FORTRAN. Το μοντέλο επιλύει τη μεταφορά και διασπορά συντηρητικών και μη σωματιδίων που εισάγονται στο θαλάσσιο χώρο για το πεδίο του Θερμαϊκού Κόλπου.

Το μοντέλο δέχεται τις τιμές μέσης με το βάθος ταχύτητας ρεύματος στο πεδίο ως δεδομένο εισόδου από το μαθηματικό ομοίωμα ανεμογενούς κυκλοφορίας και μετεωρολογικής παλίρροιας, ενώ και ο υπολογιστικός κানাβος είναι κοινός μεταξύ των δύο μοντέλων και έχει ανάλυση $dx=dy=1/60^\circ$.

Έτσι, για την προσομοίωση της κίνησης των σωματιδίων, το μοντέλο «διαβάζει» από εξωτερικά αρχεία τη **βαθυμετρία του πεδίου** και το **πεδίο μέσων με το βάθος ταχυτήτων ρεύματος** και στη συνέχεια προσδιορίζει την καθοριστική και τη στοχαστική μετατόπιση των σωματιδίων που έχουν εισαχθεί στη ροή από τις πηγές, υπολογίζοντας, τελικά, τη συνολική κίνηση των σωματιδίων για το σύνολο της προσομοίωσης, με συνολική διάρκεια **5 ημερών**.

Δ.7.24. Διασπορά με μοντέλο ιχνηθέτη

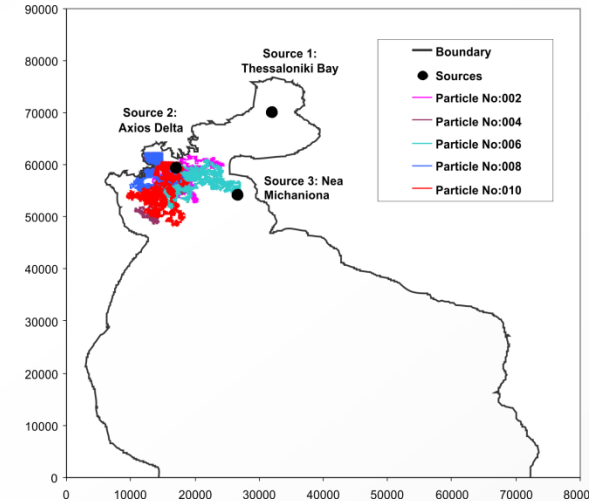
Το μοντέλο TracerModel2D – Δεδομένα εισόδου/εξόδου

Ο χρήστης μπορεί να επιλέξει μία από τις τρεις πιθανές θέσεις πηγής σωματιδίων:

Όρμος Θεσσαλονίκης

οι εκβολές του Αξιού ποταμού

η θαλάσσια περιοχή ανοιχτά της Νέας Μηχανιώνας.



Παράλληλα, είναι δυνατός ο ορισμός του πλήθους των σωματιδίων που εισέρχονται στη ροή (μεταξύ 5 και 500 σωματιδίων). Σημειώνεται ότι τα σωματίδια στο σύνολό τους εισάγονται στη θέση της πηγής στην επιφάνεια της θάλασσας ($z=0$) και στην αρχή του υπολογιστικού χρόνου ($t=0$). Ο χρήστης μπορεί να επιλέξει, επίσης, τη **διάμετρο** του **σωματιδίου**, ώστε να υπολογιστεί από το μοντέλο η **ταχύτητα καθίζησης** του **σωματιδίου** και να **προσδιοριστεί** ο **ρυθμός καθόδου** του προς το **θαλάσσιο πυθμένα**. Οι συνιστώμενες τιμές για τη διάμετρο είναι μεταξύ **1mm** και **1 μ m**. Σε περίπτωση που ο χρήστης δεν επιθυμεί να ληφθεί υπόψη καθίζηση από το μοντέλο, θα πρέπει να επιλέξει τιμή μικρότερη των 0.000001m. Όταν κάποιο από τα σωματίδια φτάσει στη στάθμη του θαλάσσιου πυθμένα, θεωρείται ότι αποτίθεται και εξαιρείται από τους υπολογισμούς για το υπόλοιπο διάστημα της προσομοίωσης. επίσης, εξαιρούνται από τα υπόλοιπα υπολογιστικά βήματα όσα σωματίδια τυχόν διαφύγουν από το νότιο ανοιχτό όριο του πεδίου.

Δ.7.24. Διασπορά με μοντέλο ιχνηθέτη

Αρχεία φακέλου του μοντέλου

Το αρχείο λήψης περιλαμβάνει συμπιεσμένο φάκελο, στον οποίο περιλαμβάνονται τα εξής αρχεία:

- TracerModel2D.exe: Εκτελέσιμο αρχείο μοντέλου TracerModel2D.
- Bathymetry.dat: Βαθυμετρία Θερμαϊκού Κόλπου (αρχείο εισόδου).
- Horizontal_fields_25.dat: Πεδίο μέσης με το βάθος ταχύτητας ρεύματος (αρχείο εισόδου).
- particle_1.txt, particle_2.txt, particle_3.txt, particle_4.txt και particle_5.txt:

Τροχιές κίνησης πέντε επιλεγμένων σωματιδίων στο πεδίο και τιμές μάζας τους (αρχεία εξόδου).

- Tracer_Model_Results.xls: Αρχείο για την οπτικοποίηση οριζόντιων τροχιών κίνησης και χρονοσειράς μάζας των σωματιδίων (αποτελέσματα) που περιλαμβάνονται στα 5 αρχεία εξόδου.

Προσοχή: Μετά τη λήψη του συμπιεσμένου φακέλου **TracerModel2D.zip** συνιστάται ο χρήστης να το αποσυμπιέσει σε τοπικό φάκελο με την εξής διεύθυνση: **C:\Projects**, ώστε να **διατηρηθούν οι συνδέσεις** μεταξύ των 5 αρχείων εξόδου και του αρχείου οπτικοποίησης των αποτελεσμάτων. Ο χρήστης, δηλαδή, θα πρέπει να δημιουργήσει φάκελο με όνομα **Projects** στον τοπικό του σκληρό δίσκο C, να αποθηκεύσει και να αποσυμπιέσει εκεί τον συμπιεσμένο φάκελο **TracerModel2D.zip**.

Δ.7.24. Διασπορά με μοντέλο ιχνηθέτη

Τρόποι επίλυσης

Μετά την αποσυμπίεση ο χρήστης θα πρέπει να βλέπει τα αρχεία που περιλαμβάνονται στην παραπάνω λίστα στη διεύθυνση **C:\Projects\TracerModel2D**. Στη συνέχεια μπορεί να εκτελεστεί απευθείας ο κώδικας (δηλαδή το εκτελέσιμο αρχείο **TracerModel2D.exe**). Με την έναρξη του προγράμματος, ο χρήστης καλείται να ορίσει τις επιθυμητές παραμέτρους της εξίσωσης μέσα από μια αλληλουχία ερωτήσεων· οι ερωτήσεις είναι γραμμένες στα αγγλικά, καθώς οι γλώσσες προγραμματισμού δεν υποστηρίζουν ελληνικά. Πιο συγκεκριμένα, οι ερωτήσεις είναι :

- 1. Select the location of the particle source by choosing the corresponding number from the list:** Thessaloniki Bay --> 1, Axios Delta --> 2, Nea Michaniona --> 3: Επιλογή θέσης πηγής με την πληκτρολόγηση 1, 2 ή 3 για επίλυση με πηγή σωματιδίων στον όρμο Θεσσαλονίκης, στο δέλτα Αξιού ή τη Νέα Μηχανιώνα.
- 2. How many particles enter at the source? Suggested values between 5 and 500:** Ο χρήστης καλείται να δώσει έναν ακέραιο αριθμό μεταξύ 5 και 500 για τον αριθμό των σωματιδίων που μπαίνουν στη ροή.
- 3. Give the value of the particle diameter in meters.** Suggested values between 0.000001 and 0.001. If you wish not to account for settling, select a value less than 0.000001:

Επιλογή διαμέτρου σωματιδίου: Ο χρήστης καλείται να δώσει δεκαδικό αριθμό μεταξύ 10^{-3} και 10^{-6} . Σε περίπτωση που δεν είναι επιθυμητή η επίλυση με καθίζηση (π.χ. διάλυμα), πρέπει να δοθεί τιμή μικρότερη του 10^{-6} .

Προσοχή: κατά την εισαγωγή δεκαδικών πρέπει το σύμβολο του δεκαδικού να γραφεί με τελεία (όχι κόμμα), π.χ. 0.000001 και όχι 0,000001.

Δ.7.24. Διασπορά με μοντέλο ιχνηθέτη

Ιδιαίτερες ρυθμίσεις

4. Is the substance conservative? If yes write Y or y. If no write N or n:

Επιλογή συντηρητικής ή μη συντηρητικής ουσίας: Ο χρήστης απαντάει στην ερώτηση με Y ή y (από το YES) εάν τα σωματίδια είναι συντηρητικά, δηλαδή εάν δεν αποδομούνται με το χρόνο και η μάζα τους παραμένει σταθερή. Σε αντίθετη περίπτωση (μη συντηρητική ουσία) ο χρήστης πρέπει να επιλέξει N ή n (από το NO). Προσοχή: για την απάντηση στην ερώτηση θα πρέπει το πληκτρολόγιο να είναι στην αγγλική γλώσσα.

5. Give the half-life value in days:

Επιλογή χρόνου ημίσειας ζωής. Θα πρέπει να εισαχθεί ο χρόνος ημίσειας ζωής σε ημέρες. Η ερώτηση εμφανίζεται μόνο εάν ο χρήστης έχει επιλέξει μη συντηρητική ουσία στην ερώτηση 4.

6. Give the particle mass:

Επιλογή μάζας σωματιδίου. Θα πρέπει να εισαχθεί ο χρόνος η μάζα του κάθε σωματιδίου. Σημειώνεται ότι οι μονάδα δεν είναι καθορισμένη και ο χρήστης μπορεί να επιλέξει αυτή που επιθυμεί· τα αποτελέσματα για τη μεταβολή μάζας θα προκύψουν στην ίδια μονάδα μάζας. Η ερώτηση εμφανίζεται μόνο εάν ο χρήστης έχει επιλέξει μη συντηρητική ουσία στην ερώτηση 4.

Σημειώνεται ότι σε περίπτωση εισαγωγής μη αποδεκτής τιμής, όπως για παράδειγμα 10m στην ερώτηση 3 (διάμετρος σωματιδίου), η ερώτηση επανεμφανίζεται και η προσομοίωση δεν ξεκινά, έως ότου ο χρήστης εισάγει **αποδεκτή τιμή**.

Δ.7.24. Διασπορά με μοντέλο ιχνηθέτη

Περιγραφή αρχείων αποτελεσμάτων

Μετά το τέλος της προσομοίωσης, τα αποτελέσματα γράφονται στα αρχεία **particle_*.txt** (όπου * η τιμή 1, 2, 3, 4 και 5). Τα αρχεία αποτελεσμάτων είναι διαμορφωμένα ως εξής:

- **1^η γραμμή:** δίνεται το νούμερο του σωματιδίου στο οποίο αντιστοιχούν τα αποτελέσματα.

- **2^η γραμμή:** Γραμμή κεφαλίδων (time[d], x[m], y[m], z[m], mass, ip).

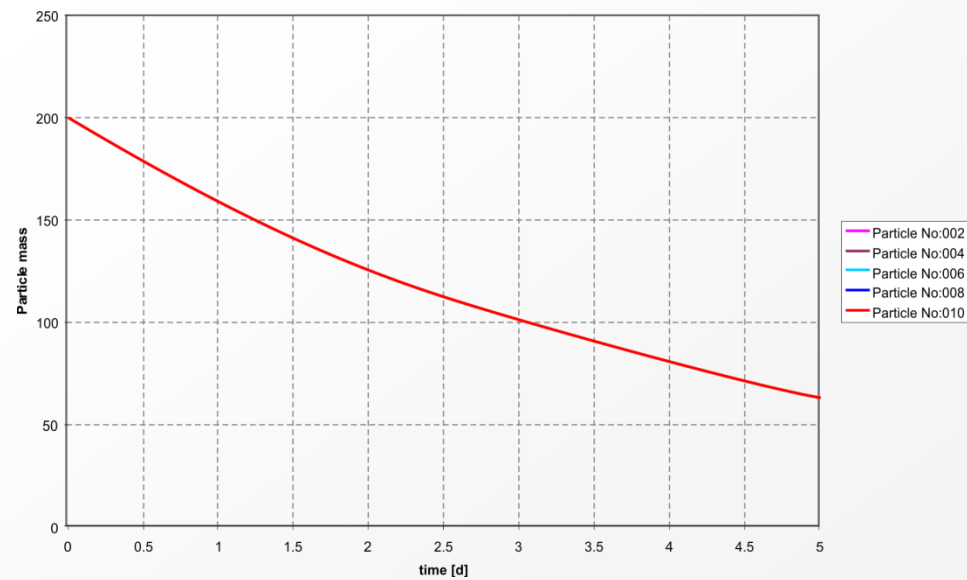
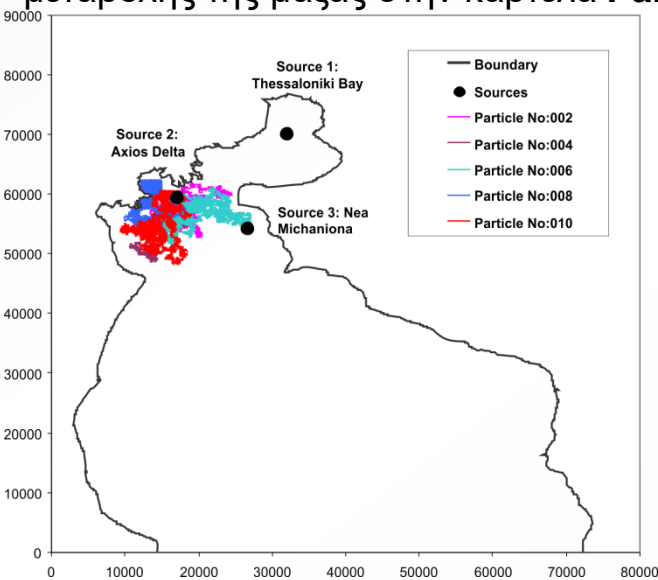
- **3^η έως και τελευταία γραμμή:**

κάθε γραμμή αντιστοιχεί στα αποτελέσματα ανά χρονικό βήμα. Οι τιμές είναι: χρόνος [ημέρες], θέση σωματιδίου κατά x [m], θέση σωματιδίου κατά y [m], θέση σωματιδίου κατά z [m], μάζα σωματιδίου και δείκτης κατάστασης σωματιδίου. Οι τιμές του δείκτη κατάστασης είναι: 0 εάν το σωματίδιο βρίσκεται σε αιώρηση, 1 εάν το σωματίδιο έχει αποθεθεί και 2 εάν το σωματίδιο έχει διαφύγει εκτός του πεδίου από το νότιο ανοιχτό όριο.

Δ.7.24. Διασπορά με μοντέλο ιχνηθέτη

Αρχεία μετα-επεξεργασίας αποτελεσμάτων

Για τη διευκόλυνση των χρηστών, δίνεται το αρχείο οπτικοποίησης αποτελεσμάτων με όνομα **Tracer_Model_Results.xls**. Ανοίγοντάς το ο χρήστης καλείται να αποδεχθεί την αυτόματη ενημέρωση των τιμών από εξωτερικά δεδομένα. Πρόκειται για τη σύνδεση με τα αρχεία αποτελεσμάτων (**particle_*.txt**) και θα πρέπει να γίνει αποδοχή της αυτόματης ανανέωσης (*Enable automatic refresh*), ώστε να μπορεί ο χρήστης να δει τα αποτελέσματα της προσομοίωσης που εκτέλεσε. Σε αντίθετη περίπτωση τα γραφήματα δε θα ανανεωθούν. Μετά την αποδοχή της αυτόματης ανανέωσης ανοίγει παράθυρο διαλόγου (5 διαδοχικές φορές) για την εισαγωγή αρχείου εισόδου τύπου **txt** (*Insert text file*) και ο χρήστης πρέπει να επιλέξει (στην περίπτωση που δεν είναι ήδη επιλεγμένα) τα αρχεία **particle_1.txt**, **particle_5.txt**. Μετά το πέρας της ενημέρωσης ο χρήστης μπορεί να δει τις οριζόντιες τροχιές των 5 σωματιδίων στο πεδίο στην καρτέλα **Horizontal_Trajectories** και τη χρονοσειρά μεταβολής της μάζας στην καρτέλα **Particle_Mass**.



Δ.7.24. Διασπορά με μοντέλο ιχνηθέτη

Ο κώδικας FORTRAN του μοντέλου TracerModel2D

```

Approximatrix Simply Fortran (UNREGISTERED)
File Edit Project Build Debug Toolbox Options View Help
Search
Project Outline
TracerModel2D.for
Untitled (target.e)
-----
program TracerModel2D
----- Parameters and Table Dimension Declaration -----
parameter(im=62,jm=46,pt=500)
c Domain-related parameters (2D-tables)
real*8 alon(im,jm),alat(im,jm),h(im,jm),u(im,jm),v(im,jm),
&fsm(im,jm),Kh(im,jm)
real*8 dx,dy,horcon
c Particle-related parameters
real*8 xo(pt),yo(pt),zo(pt),x(pt),y(pt),z(pt),age(pt),mass(pt),
&hp(pt)
real*8 d50,ws,g,pi,tim,red,T50,mass0
real*8 h1,h2,h3,h4,h5,h6,h7,h8,h9,r1,r2,r3,r4,r5,r6,r7,r8,r9,
&u1,u2,u3,u4,u5,u6,u7,u8,u9,v1,v2,v3,v4,v5,v6,v7,v8,v9,
&ed1,ed2,ed3,ed4,ed5,ed6,ed7,ed8,ed9,f1,f2,f3,f4,f5,f6,f7,f8,f9,
&hh,ed,uu,vv,edmin
integer ip(pt),nm,ndays,iso(10),iso(10),pout(10),p_ptot
character*1 ptype
-----
c
c ----- Definition of simulation parameters -----
g=9.8065
pi=3.1415926535897932384626433832795
dt=20.0
ndays=5.
tim=0.0
horcon=0.1
edmin=5.
nm=int(ndays*86400/dt)
iso(1)=24;iso(1)=40
iso(2)=13;iso(2)=34
iso(3)=20;iso(3)=31
-----
c
c *****
c Reading input data
c Domain depths and seawater velocities
open(1,file='Bathymetry.dat')
open(2,file='Horizontal_fields_25.dat')
do l=1,im*jm
read(1,*)i,j,alon(i,j),alat(i,j),dx,dy,h(i,j)
read(2,*)i,j,alon(i,j),alat(i,j),u(i,j),v(i,j),zz
c setting mask values: water cell --> fsm=1, land cell --> fsm=0
if(h(i,j).gt.2)then
h(i,j)=max(h(i,j),15.0)
fsm(i,j)=1.0
else
fsm(i,j)=0.0
endif
enddo
close(1);close(2)
dx=1358.;dy=1779.
User defined input parameters
    
```


Δ.7.24. Διασπορά με μοντέλο ιχνηθέτη

Ο κώδικας FORTRAN του μοντέλου TracerModel2D

```

Approximatrix Simply Fortran (UNREGISTERED)
File Edit Project Build Debug Toolbox Options View Help
TracerModel2D.for
Project Outline
Untitled (target.e)
dx=1358.;dy=1779.
c
c      _____ User-defined input parameters _____
c
c      choosing the particle source
write(*,*)'*****'
54 write(*,*)'Select the location of the particle source'
write(*,*)'by choosing the corresponding number from the list:'
write(*,*)'Thessaloniki Bay --> 1'
write(*,*)'Axios Delta --> 2'
write(*,*)'Nea Michaniona --> 3'
read(*,*)isource
if(isource.eq.1)then
is=iso(1);js=jso(1)
elseif(isource.eq.2)then
is=iso(2);js=jso(2)
elseif(isource.eq.3)then
is=iso(3);js=jso(3)
else
write(*,*)'Invalid source number. Please try again.'
goto 54
endif
c
c      choosing total number of particles for simulation
write(*,*)'*****'
55 write(*,*)'How many particles enter at the source?'
write(*,*)'suggested values between 5 and 500'
read(*,*)ptot
if(ptot.lt.5.or.ptot.gt.500)then
write(*,*)'Invalid number of particles. Please try again.'
goto 55
endif
c
c      choosing the particle diameter and type
write(*,*)'*****'
56 write(*,*)'Give the value of the particle diameter in meters'
write(*,*)'suggested values between 0.000001 and 0.001'
write(*,*)'If you wish not to account for settling, select a value
&less than 0.000001'
read(*,*)d50
if(d50.gt.0.0011)then
write(*,*)'Invalid particle diameter. Please try again.'
goto 56
endif
if(d50.lt.0.000001)then
ws=0.0
else
ws=((2000.-1024.)/1024.)*g*(d50**2.)/(18.*10.**(-3.))
endif
ws=min(ws,0.001)
write(*,*)'(a30.x,f10.3,x,a5)')Stokes settling velocity, ws=',ws,
&'m/s'
write(*,*)'*****'
57 write(*,*)'Is the substance conservative?'
write(*,*)'If yes write Y or y'
write(*,*)'If no write N or n'
read(*,*)ntype
    
```


Δ.7.24. Διασπορά με μοντέλο ιχνηθέτη

Ο κώδικας FORTRAN του μοντέλου TracerModel2D

```

Approximatrix Simply Fortran (UNREGISTERED)
File Edit Project Build Debug Toolbox Options View Help
[Icons] Search
Project Outline
TracerModel2D.for
-----
write(*,*)'***** Simulation begun *****'
g*****'

xo(1:ptot)=dx*(dfloat(is)-0.5) !x location of source
yo(1:ptot)=dy*(dfloat(js)-0.5) !y location of source
zo(1:ptot)=0.0 !z location of source
mass(1:ptot)=mass0 !particle mass
age(1:ptot)=0.0 !particle age
ip(1:ptot)=0 !particle index for suspended particles
write(*,*)'done array initialisation'

c
*****

c
----- Main Program -----
c
Calculating Smagorinski diffusivity
do i=2,im-1
do j=2,jm-1
Kh(i,j)=horcon*dx*dy*sqrt(((u(i+1,j)-u(i,j))/dx)**2.
$+((v(i,j+1)-v(i,j))/dy)**2.+0.5*(0.25*(u(i,j+1)+u(i+1,j+1)
$-u(i,j-1)-u(i+1,j-1))/dy+.25*(v(i+1,j)-v(i+1,j+1)
$-v(i-1,j)-v(i-1,j+1))/dx)**2.)*fsm(i,j)
Kh(i,j)=max(Kh(i,j),edmin)
enddo
enddo

do i=1,im
Kh(i,1)=Kh(i,2)*fsm(i,1)
Kh(i,jm)=Kh(i,jm-1)*fsm(i,jm)
enddo

do j=1,jm
Kh(1,j)=Kh(2,j)*fsm(1,j)
Kh(im,j)=Kh(im-1,j)*fsm(im,j)
enddo

c
opening 5 files for output
nout=int(ptot/5)
do ll=1,5
pout(ll)=ll*nout
open(ll,file='particle_'//char(ll+48)//'.txt')
write(ll,'(a14,x,i10)')'Particle No:',pout(ll)
write(ll,'(a7,5(x,a4))')'time[d]','x[m]','y[m]','z[m]','mass','ip'
enddo

c
----- Temporal Loop -----
do n=1,nm
tim=tim+dt !increase time
if(mod(tim,100.).eq.0)write(*,*)'time=',tim/86400.,'days'
c
----- Particle Loop -----
do p=1,ptot
if(ip(p).eq.0)then ! loop active only for particles in the water column
age(p)=age(p)+dt !increasing particle age
mass(p)=mass0*exp(-T50*tim)
i=int(xo(p)/dx)+1;j=int(yo(p)/dy)+1
    
```

Δ.7.24. Διασπορά με μοντέλο ιχνηθέτη

Ο κώδικας FORTRAN του μοντέλου TracerModel2D

```

Approximatrix Simply Fortran (UNREGISTERED)
File Edit Project Build Debug Toolbox Options View Help
Project Outline
TracerModel2D for
! write(*,*)'done interpolation'
! pause
44 call random(temp)
x(p)=xo(p)+uu*dt+ed*(2.*temp-1.)*dt
call random(temp)
y(p)=yo(p)+vv*dt+ed*(2.*temp-1.)*dt
z(p)=zo(p)+ws*dt
! write(*,*)'x,y,z',x(p),y(p),z(p)
c _____Checking boundary conditions:_____
ii=int(x(p)/dx)+1;jj=int(y(p)/dy)+1; !new i and j coordinates
c Open boundary condition
= if(y(p).le.dy/2)then !--> the particle has crossed the southern open boundary
-- ip(p)=3
-- do ll=1,5
-- if(p.eq.pout(ll))write(11,32)tim/86400.,x(p),y(p),z(p),mass(p),
&ip(p)
-- enddo
-- goto 101
-- endif
c Land boundary conditions
= if(h(ii,jj).le.1.1)then !--> the particle has moved on dry land
-- if((ii.ne.i).and.(jj.eq.j)) then !--> reflection in the x direction
-- x(p)=xo(p)
-- elseif((ii.eq.i).and.(jj.ne.j)) then !--> reflection in the y direction
-- y(p)=yo(p)
-- else !--> reflection in both (x,y) directions
-- x(p)=xo(p)
-- y(p)=yo(p)
-- endif
-- endif
c Bottom conditions
= if(z(p).ge.hh)then !the particle has deposited
-- ip(p)=1
-- endif
c _____ setting time step as past values _____
-- xo(p)=x(p);yo(p)=y(p);zo(p)=z(p)
-- do ll=1,5
-- if(p.eq.pout(ll))write(11,32)tim/86400.,x(p),y(p),-z(p),mass(p),
&ip(p)
-- enddo
32 format(f8.6,4(x,f12.6),x,i5)
-- endif
101 enddo !end of particle loop (do p=1,ptot)
-- enddo !end of temporal loop (do n=1,nm)
c
stop
end
    
```

Δ.7.25. Βιβλιογραφία

Ελληνική:

Κρεστενίτης Γ.Ν., Κομπιάδου Κ.Δ., Μακρής Χ.Β., Ανδρουλιδάκης Γ.Σ., Καραμπάς Θ.Β. (2015). **Παράκτια Μηχανική – Θαλάσσια Περιβαλλοντική Υδραυλική**, Ελληνικά Ακαδημαϊκά Ηλεκτρονικά Συγγράμματα και Βοηθήματα, Κάλλιπος, Αθήνα. Link: <https://repository.kallipos.gr/handle/11419/2789?locale=en> **8^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ**

Τσακογιάννης Ι.Α. (1985). **Εισαγωγή στη Μοντελοποίηση της Ρύπανσης των Φυσικών Ρευμάτων**, Πανεπιστημιακές Σημειώσεις ΑΠΘ, Θεσσαλονίκη. **4^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ**

Ξενόγλωσση:

Fischer, H.B., List, E.J., Koh, R.C.Y, Imberger, J., & Brooks, N. (1979). **Mixing in Inland and Coastal Waters**, Academic Press, New York. **10^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ**

Chin D. A. (2006). **Water-Quality Engineering In Natural Systems**. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey. **8^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ**

Kachiashvili K.J. and Melikdzhanian D.Y. (2012). **Advanced modeling and computer technologies for fluvial water quality research and control**. Nova Science Publishers, Inc. **1^ο – 2^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ**

Δ.7.25. Βιβλιογραφία

Ελληνική:

Κρεστενίτης Γ.Ν., Κομπιάδου Κ.Δ., Μακρής Χ.Β., Ανδρουλιδάκης Γ.Σ., Καραμπάς Θ.Β. (2015). **Παράκτια Μηχανική – Θαλάσσια Περιβαλλοντική Υδραυλική**, Ελληνικά Ακαδημαϊκά Ηλεκτρονικά Συγγράμματα και Βοηθήματα, Κάλλιπος, Αθήνα. Link: <https://repository.kallipos.gr/handle/11419/2789?locale=en> **6^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ**

Τσακογιάννης Ι.Α. (1985). **Εισαγωγή στη Μοντελοποίηση της Ρύπανσης των Φυσικών Ρευμάτων**, Πανεπιστημιακές Σημειώσεις ΑΠΘ, Θεσσαλονίκη. **2^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ (II.2 και II.3)**

Ξενόγλωσση:

Fischer, H.B., List, E.J., Koh, R.C.Y, Imberger, J., & Brooks, N. (1979). **Mixing in Inland and Coastal Waters**, Academic Press, New York. **2^ο - 3^ο - 4^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ**

Benedini M., and Tsakiris G. (2013). **Water Quality Modelling for Rivers and Streams**. Water Science and Technology Library, Vol. 70, Springer. **3^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ**

Chin D. A. (2006). **Water-Quality Engineering In Natural Systems**. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey. **3^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ**

Ji Z.G. (2008). **Hydrodynamics and Water Quality**. John Wiley & Sons, Inc. , Hoboken, New Jersey. **2^ο ΚΕΦΑΛΑΙΟ**

Δ.7.25. Βιβλιογραφία

Κουτίτας ΧΓ (2005). Υπολογιστική Υδραυλική, Εκδ. Επίκεντρο, Σελ.: 199, ISBN:9789606645501

Κεφάλαιο 7

Koutitas C.G., Scarlatos P.D. (2016). Computational Modelling in Hydraulic and Coastal Engineering. CRC Press, Taylor & Francis Group. Κεφάλαιο 8

