

**Model dyfuzyjno – adwekcyjny
rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w
kanałach otwartych.**

MONIKA BARCZYK

1. Wstęp

Z punktu widzenia hydromechaniki przepływ zarówno w rzece jak i w kanałach sztucznych traktuje się jako przepływ w kanałach otwartych. *Kanał otwarty* jest przewodem przepływowym, w którym z definicji, występuje powierzchnia swobodna przepływającej wody i kontaktujący się z atmosferą. Brzeg ten jest powierzchnią międzyfazową oddzielającą płyny o różnych właściwościach: wodę i powietrze atmosferyczne.

Rzeki są odbiornikiem wielu substancji, które trafiają do nich w efekcie naturalnych procesów geofizycznych jak i aktywności ludzkiej : drobne cząstki mineralne, środki chemiczne i ścieki, które w przeciwieństwie do domieszek wynikających z procesów naturalnych, wprowadzanych w sposób ciągły na długości kanału wprowadzane są lokalnie np. w punkcie ujścia kanału ściekowego do rzeki.

Przedstawione w pracy rozważania, dotyczą *domieszek pasywnych* to znaczy takich, które nie mają wpływu na kształtowanie się pola prędkości strumienia. Pozwala to na rozdzielenie dynamiki przepływu wody i dynamiki transportu masy substancji rozpuszczonej. W środowisku naturalnym w zasadzie wszystkie domieszki mają charakter pasywny.

2. Podstawy fizyczne.

Podstawową miarą czynnika w wodzie jest jego *koncentracja* definiowana jako stosunek masy czynnika do objętości wody, w której jest rozpuszczony:

$$c = \frac{M}{W}$$

gdzie c – koncentracja

M – masa czynnika

W – objętość płynu

Jednostką koncentracji jest więc $[\text{kg m}^3]$.

Transport czynnika rozpuszczonego w wodzie definiuje *strumień* Φ . Pod tym pojęciem rozumie się masę czynnika przepływającego przez jednostkę powierzchni prostopadłej do kierunku przepływu w jednostce czasu. Typową jednostką jest $[\text{m}^2\text{s}^{-1}]$.

Proces przenoszenia dowolnego czynnika rozpuszczonego w wodzie jest efektem działania dwóch podstawowych mechanizmów transportu: *adwekcji i dyfuzji*. Trzeci mechanizm przenoszenia, jakim jest promieniowanie, w tym przypadku nie odgrywa żadnej roli.

2.1. Adwekcja

Adwekcja (niekiedy zwana *konwekcją* w zależności od mechanizmu generującego ruch płynu) jest transportem wywołanym przez ruch wody. Domieszka porusza się z prędkością wody. Strumień wywołany adwekcją ma postać:

$$\Phi = Uc$$

gdzie: Φ - adwekcyjny strumień masy

U – prędkość strumienia.

Jeśli strumień płynie ze stałą prędkością U , adwekcja nie powoduje zmiany kształtu początkowego rozkładu koncentracji wzdłuż osi kanału. Ulegnie on zmianie, gdy prędkość strumienia będzie zmienna. Środek ciężkości rozkładu koncentracji porusza się ze środkiem prędkości strumienia.

2.2. Dyfuzja

Dyfuzja jest procesem przenoszenia czynnika w kierunku zmniejszającej się koncentracji tego czynnika. Strumień masy wywołany dyfuzją jest proporcjonalny do gradientu koncentracji. Na przykład w kierunku x wynosi on:

$$\Phi_x = -D^M \frac{\partial c}{\partial x}$$

gdzie: Φ_x – dyfuzyjny strumień masy,

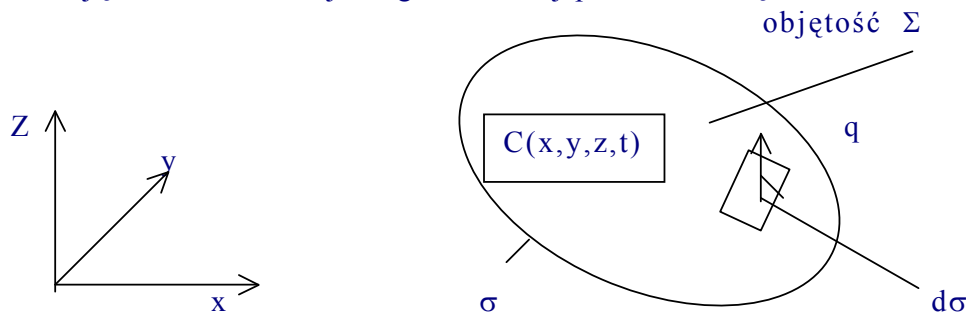
$\frac{\partial c}{\partial x}$ – gradient koncentracji,

D^M – współczynnik dyfuzji molekularnej.

Równanie to znane jest jako **I prawo dyfuzji Ficka**. Ujemny znak wskazuje dodatni strumień w kierunku ujemnego gradientu, tzn. w kierunku zmniejszającej się koncentracji. Powyższe równanie opisuje tzw. *dyfuzję molekularną*. Jest ona istotnym procesem transportu, gdy woda jest w spoczynku lub przepływ jest laminarny, czyli liczba Reynoldsa $Re = vl/\nu < 1100$ (v – prędkość, l – charakterystyczny rozmiar, ν – współczynnik lepkości). Współczynnik dyfuzji molekularnej zależy od własności fizycznych roztworu, temperatury i jest zbliżony do wartości współczynnika lepkości dynamicznej wody $D^M \approx 10^{-6} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$. Dyfuzja w odróżnieniu od adwekcji jest procesem nieodwracalnym.

2.3. Równanie przenoszenia adwekcyjno – dyfuzyjnego.

W objętości kontrolnej Σ ograniczonej powierzchnią σ



zmiana w czasie zawartości czynnika rozpuszczonego w wodzie w wodzie może wynikać tylko z przepływu strumienia masy przez powierzchnię ograniczającą σ lub wskutek przemian powodujących wzrost lub zanik czynnika w masie wody. Można to zapisać:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Sigma} c d\Sigma + \int_{\sigma} q n d\sigma + \int_{\Sigma} \delta d\Sigma = 0$$

gdzie: c – koncentracja

q – strumień masy przepływający przez powierzchnię ograniczającą σ ;

n – wektor normalny do powierzchni σ ;

δ – gęstość źródła wewnętrznego, która określa intensywność generowania, lub zanikania przenoszonego czynnika w jednostce objętości wody.

Wykorzystując twierdzenie Gaussa – Ostrogradskiego:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div} q + \delta = 0$$

Wstawiając w miejsce wektora q strumień adwekcyjny i dyfuzyjny otrzymujemy:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}(Uc - D^M \text{grad}c) + \delta = 0$$

gdzie: $U = (u, v, w)^T$ – to wektor prędkość,

D^M – to tensor dyfuzji molekularnej, mający niezerowe elementy D_x^M, D_y^M, D_z^M tylko na głównej przekątnej.

Po rozpisaniu:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uc) + \frac{\partial}{\partial y}(vc) + \frac{\partial}{\partial z}(wc) - \frac{\partial}{\partial x}(D_x^M \frac{\partial c}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y}(D_y^M \frac{\partial c}{\partial y}) - \frac{\partial}{\partial z}(D_z^M \frac{\partial c}{\partial z}) + \delta = 0$$

Wykorzystując równanie ciągłości $\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$ i zakładając, że mieszanina wody

i substancji rozpuszczonej jest ośrodkiem izotropowym którego $D_x^M = D_y^M = D_z^M = D^M$ otrzymujemy:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x}(D^M \frac{\partial c}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y}(D^M \frac{\partial c}{\partial y}) - \frac{\partial}{\partial z}(D^M \frac{\partial c}{\partial z}) + \delta = 0$$

Jest to równanie adwekcji – dyfuzji w przestrzeni trójwymiarowej, w którym uwzględniono proces dyfuzji molekularnej. Tymczasem każdy makroskopowy przepływ jest przepływem burzliwym, który charakteryzuje się fluktuacjami prędkości i ciśnienia o charakterze losowym. Konsekwencją tego są fluktuacje koncentracji. Wyjściem z sytuacji jest założenie, że chwilowe wartości prędkości i koncentracji są sumą średnich w czasie wartości tych wielkości i ich fluktuacji. Chwilowe wartości tych prędkości przedstawiamy więc następująco:

$$\begin{aligned} u &= \bar{u} + u' \\ v &= \bar{v} + v' \\ w &= \bar{w} + w' \\ p &= \bar{p} + p' \\ c &= \bar{c} + c' \end{aligned}$$

Podstawiając te zależności i przekształcając równanie z zachowaniem zasad na wartościach średnich, otrzymujemy równanie:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \text{div}(\bar{U}\bar{c} - D^M \text{grad}\bar{c} + \overline{U'c'}) + \delta = 0$$

gdzie człon $\overline{U'c'}$ reprezentuje burzliwy transport masy spowodowany lokalnymi fluktuacjami prędkości i koncentracji, do którego reprezentacji wykorzystuje się zależność empiryczną, zakładającą, że transport burzliwy może być opisany za pomocą wartości średnich analogicznie do dyfuzji molekularnej, czyli formułami:

$$\overline{u'c'} = -D_x^B \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \quad \overline{v'c'} = -D_y^B \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \quad \overline{w'c'} = -D_z^B \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}$$

w których D_x^B, D_y^B, D_z^B współczynniki dyfuzji burzliwej.

Dyfuzja burzliwa jest dużo większa od dyfuzji molekularnej. D^B jest rzędu $10^{-3} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$, z tego względu dyfuzje molekularna można pominąć. Dla uproszczenia pominąć można też symbole uśrednionych funkcji c . Otrzymujemy wtedy równanie:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}(Uc - D^B \text{grad}c) + \delta = 0$$

W ogólnym przypadku współczynniki dyfuzji burzliwej mają różne wartości w kierunkach x, y, z i są funkcjami położenia. Dla warunków izotropowych są takie same.

Powyższe równanie opisuje przypadek trójwymiarowy transportu adwekcyjno-dyfuzyjnego uśrednionego w czasie. Znając trójwymiarowe pole prędkości i współczynnik dyfuzji można to równanie rozwiązać otrzymując $c(x,y,z,t)$.

W praktyce rzadko dysponujemy trójwymiarowym polem prędkości. Zajmując się przepływami płaskimi, i zakładając, że nie generują się nam i nie zanikają domieszki, upraszczamy nasze równanie do postaci:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uc) + \frac{\partial}{\partial y}(vc) - \frac{\partial}{\partial x}(D_x^B \frac{\partial c}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y}(D_y^B \frac{\partial c}{\partial y}) = 0$$

3. Podstawy numeryczne

Metoda różnic skończonych

Metoda różnic skończonych jest jedna z najczęściej stosowanych metod rozwiązywania równań różniczkowych, cząstkowych. Polega ona na bezpośrednim zastąpieniu równania różniczkowego przez odpowiednie równanie różnicowe.

Dyskretyzację można aproksymować **pierwszą pochodną** np.:

ilorazem różnicowym przednim:

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \frac{f_{j+1} - f_j}{\Delta x}$$

ilorazem różnicowym wstecznym:

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \frac{f_j - f_{j-1}}{\Delta x}$$

ilorazem różnicowym centralnym:

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2\Delta x}$$

drugą pochodną np.:

formułą trzypunktową symetryczną:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \approx \frac{f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}}{\Delta x^2}$$

3.2. Rozwiązanie równania transportu adwekcyjno -dyfuzyjnego

Rozwiązanie równania transportu adwekcyjno dyfuzyjnego, ze względu na jego dwoisty charakter nie jest sprawą prostą. Część adwekcyjna ma charakter hiperboliczny, a część dyfuzyjna jest typu parabolicznego. Trudności te występują szczególnie, gdy dominuje przenoszenie adwekcyjne. Kryterium udziału obu członów w przenoszeniu jest tzw. Liczba Pecleta, która dla siatki węzłów odległych od siebie o Δx definiuje się następująco:

$$P = u\Delta x/D,$$

gdzie: u – prędkość średnia strumienia

D - współczynnik dyfuzji.

$P = \infty$ dla przenoszenia wyłącznie adwekcyjnego, gdy $D=0$;

$P = 0$ dla przenoszenia wyłącznie dyfuzyjnego $u=0$.

3.3. Rozwiązanie równania transportu adwekcyjno-dyfuzyjnego metodą różnic skończonych.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} - D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) = 0$$

dyskretyzacja:

- pochodną względem czasu zastępujemy ilorazem różnicowym przednim:

$$\frac{\partial c}{\partial t} \approx \frac{c_{i,j}^{n+1} - c_{i,j}^n}{\Delta t}$$

- drugą pochodną względem położenia wyrażeniem obliczonym na poziomie czasowym n:

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \approx \frac{c_{i-1,j}^n - 2c_{i,j}^n + c_{i+1,j}^n}{\Delta x^2} \quad \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \approx \frac{c_{i,j-1}^n - 2c_{i,j}^n + c_{i,j+1}^n}{\Delta y^2}$$

- pierwszą pochodną względem położenia w zależności od znaku

$$u \geq 0 \quad \frac{\partial c}{\partial x} \approx \frac{c_{i,j}^n - c_{i-1,j}^n}{\Delta x}, \quad u < 0 \quad \frac{\partial c}{\partial x} \approx \frac{c_{i+1,j}^n - c_{i,j}^n}{\Delta x}$$

$$v \geq 0 \quad \frac{\partial c}{\partial y} \approx \frac{c_{i,j}^n - c_{i,j-1}^n}{\Delta y}, \quad v < 0 \quad \frac{\partial c}{\partial y} \approx \frac{c_{i,j+1}^n - c_{i,j}^n}{\Delta y}$$

dla składowych prędkości większych od zera otrzymujemy równanie różnicowe:

$$c_{i,j}^{n+1} = c_{i,j}^n + D \left(\frac{c_{i-1,j}^n - 2c_{i,j}^n + c_{i+1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{c_{i,j-1}^n - 2c_{i,j}^n + c_{i,j+1}^n}{\Delta y^2} \right) - \Delta t \left(u \frac{c_{i,j}^n - c_{i-1,j}^n}{\Delta x} + \frac{c_{i,j}^n - c_{i,j-1}^n}{\Delta y} \right)$$

4. Opis programu

Celem programu jest obliczanie koncentracji zanieczyszczeń w każdym kroku czasowym we wszystkich punktach $c_{i,j}$. Wyniki wyświetlane są po każdym kroku czasowym.

4.1. Ustawienia i parametry początkowe

Koncentracja początkowa:

- stała – w pierwszym kroku czasowym koncentracja w każdym punkcie (x,y) wynosi 1;
- miejscowa – w pierwszym kroku czasowym koncentracja wynosi 1 dla wszystkich punktów (3,y), i 0 dla pozostałych;

Równanie transportu:

- Dyfuzja – obliczanie koncentracji w każdym następnym kroku czasowym z uwzględnieniem tylko dyfuzji;
- Adwekcja – obliczanie koncentracji w każdym następnym kroku czasowym z uwzględnieniem tylko adwekcji;

- Dyfuzja + Adwekcja - obliczanie koncentracji w każdym następnym kroku czasowym z uwzględnieniem adwekcji i dyfuzji;

D – współczynnik dyfuzji;

Krok – liczba kroków czasowych;

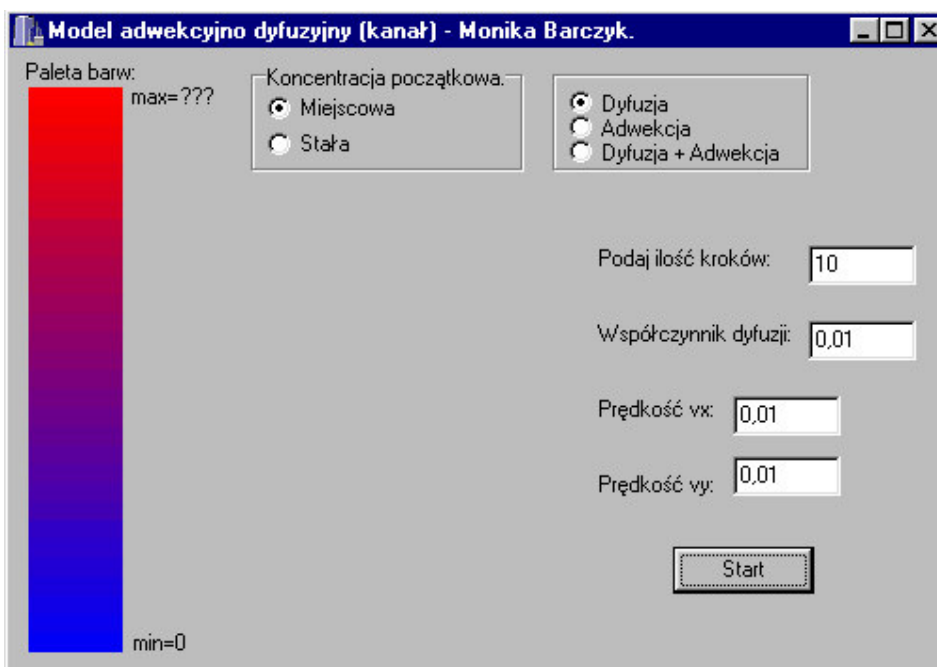
4.1.1. Kanał

Oblicza koncentrację w przypadku zwykłego przepływu płaskiego w kanale ze sztywnymi brzegami na górze i na dole i periodycznymi warunkami brzegowymi na wejściu i wyjściu tzn. zanieczyszczenia wypływające na wyjściu wracają na wejściu.

V_x – składowa x wektora prędkości

V_y – składowa y wektora prędkości

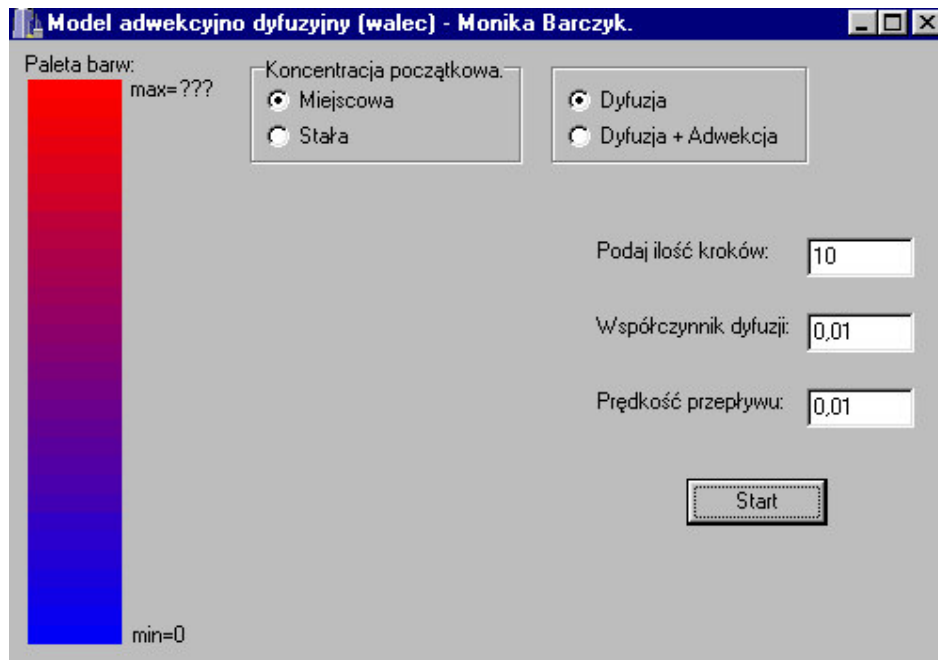
Na ich podstawie ustalane jest pole prędkości. Prędkość jest stała w każdym punkcie.



4.1.2. Walec

Oblicza koncentrację w przypadku płaskiego przepływu w kanale z umieszczoną wewnątrz przeszkodą w kształcie walca ze sztywnymi warunkami brzegowymi na górze i dole i swobodnymi na wejściu i wyjściu tzn. cząstki zanieczyszczeń nie są zatrzymywane i mogą odpływać w obydwie strony.

V – prędkość przepływu jednorodnego (wartość prędkości w nieskończoności); na jej podstawie wyznaczane jest pole prędkości w każdym punkcie (x,y).



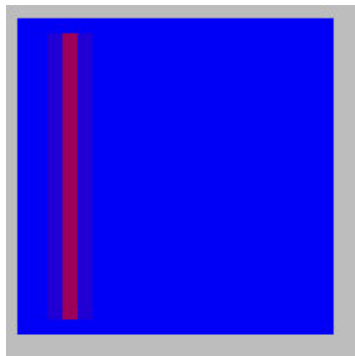
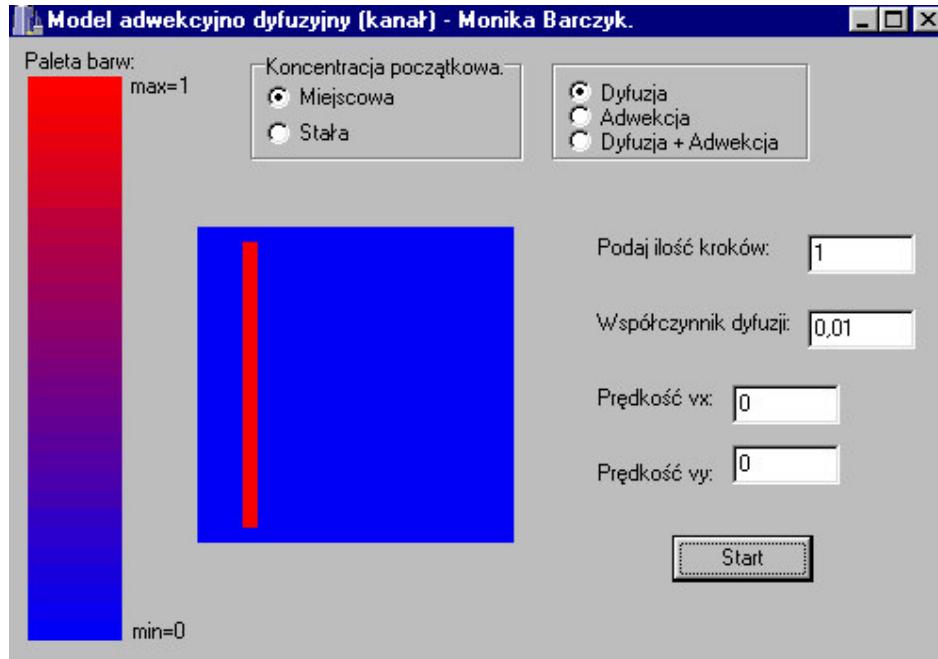
Krok czasowy Δt i przestrzenny Δx i Δy są w obydwu przypadkach zawsze równe 1.

Program nie jest niestabilny w przypadku dominacji członu adwekcyjnego nad dyfuzyjnym.

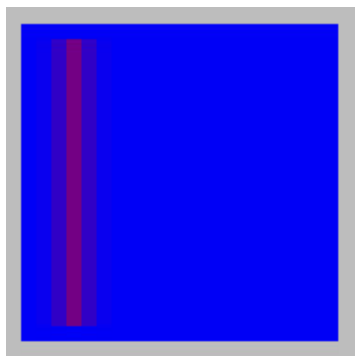
5. Przykładowe wyniki

5.1. Kanał

Dyfuzja:

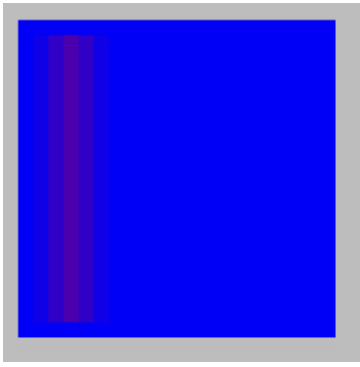


25 kroków

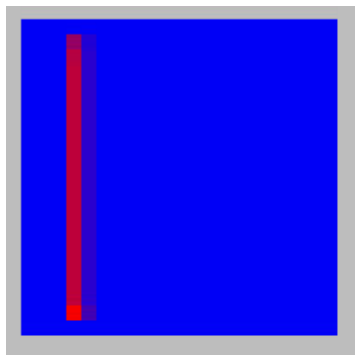
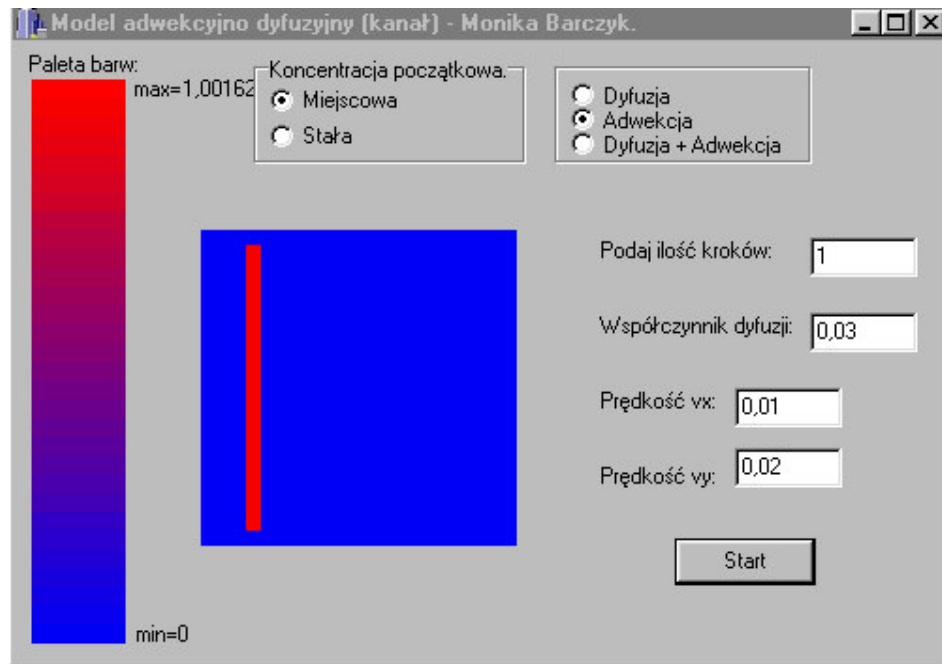


50 kroków

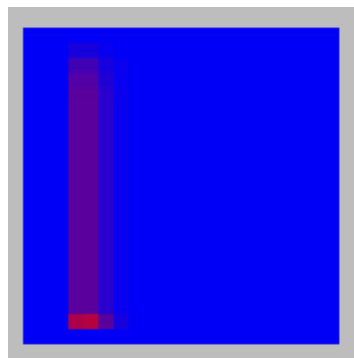
100 kroków



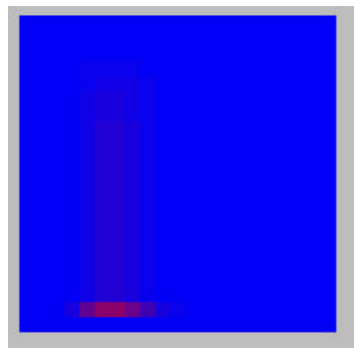
Adwekcja:



25 kroków

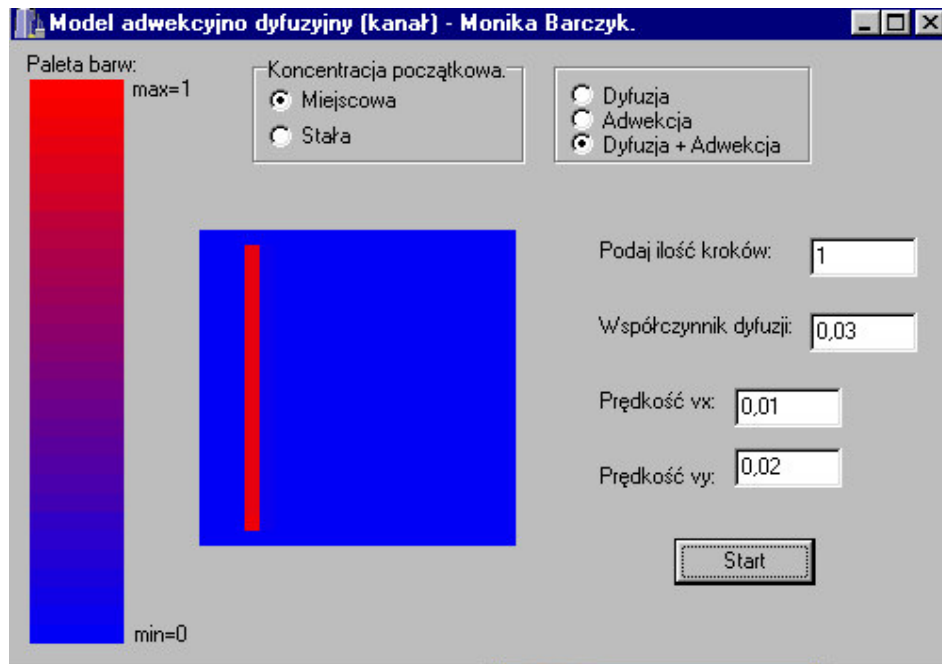


100 kroków

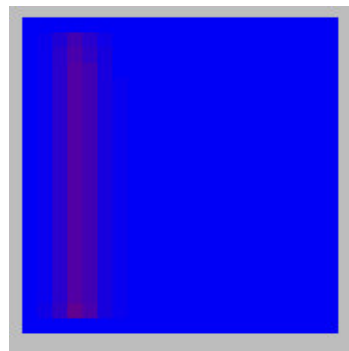


300 kroków

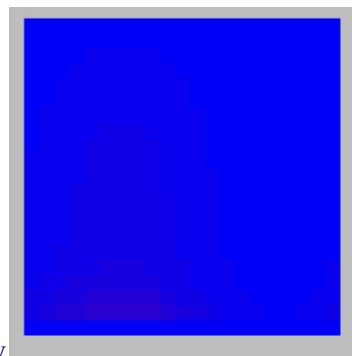
Dyfuzja + Adwekcja:



25 kroków

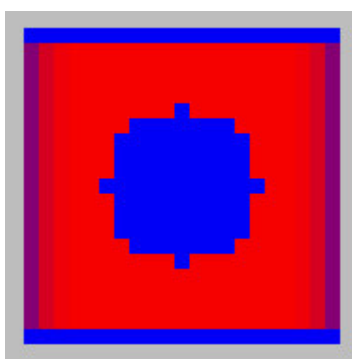
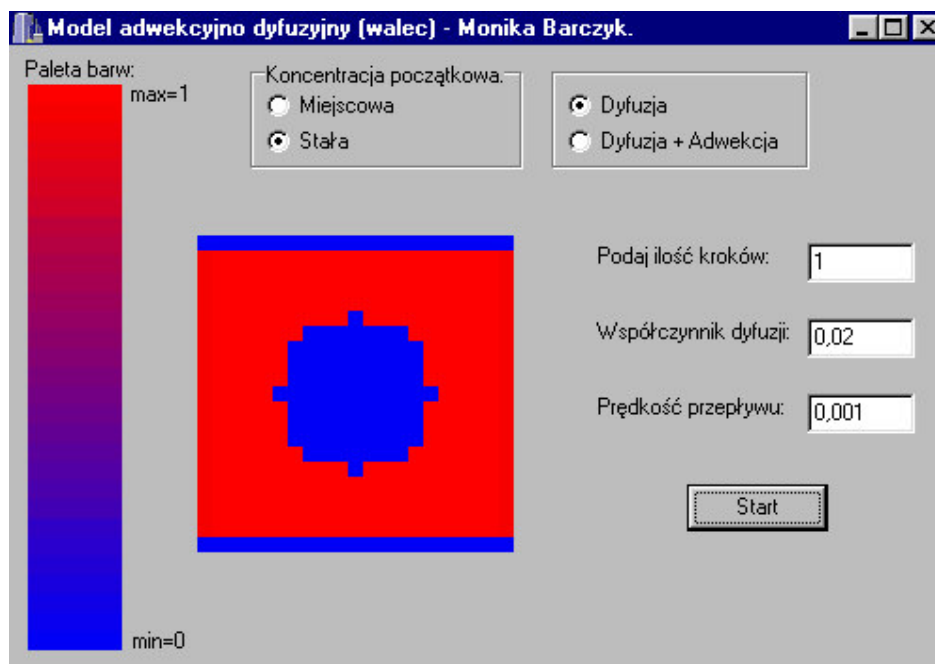


300 kroków

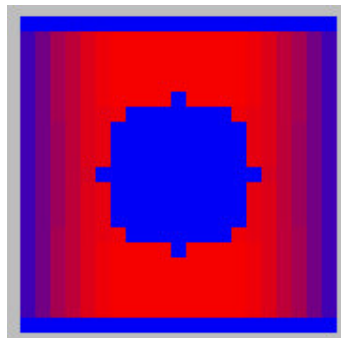


5.2. Walec

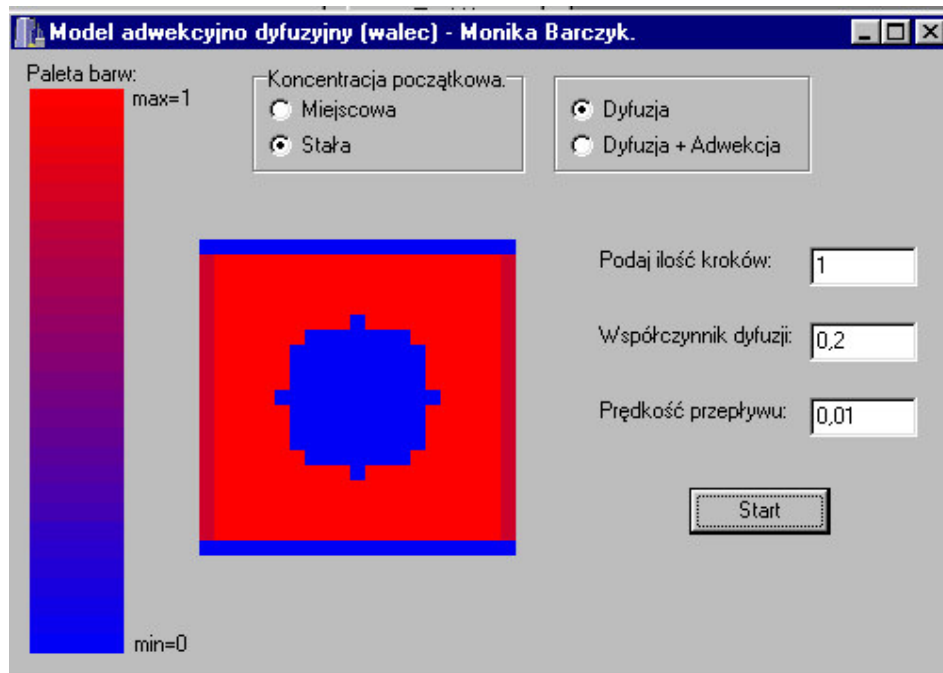
Dyfuzja:



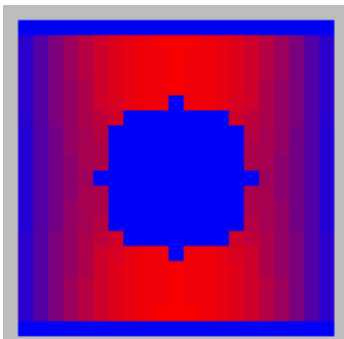
50 kroków



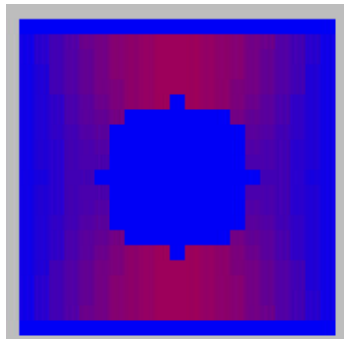
250 kroków



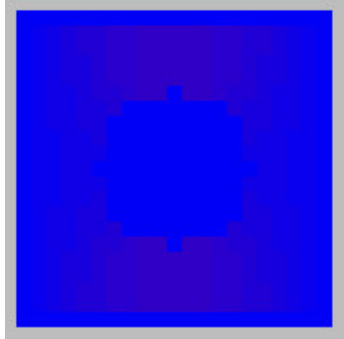
50 kroków



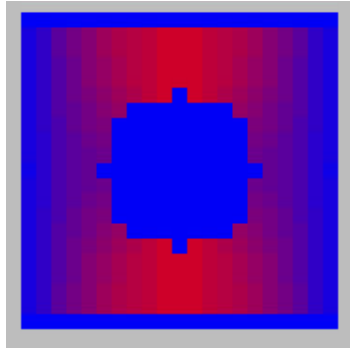
150 kroków



50 kroków



Dyfuzja + Adwekcja



1000 kroków

6. Literatura

1. Romuald Szymkiewicz „Modelowanie matematyczne przepływów w rzekach i kanałach.
2. Ryszard Gryboś „Podstawy mechaniki płynów”