

ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ
ΡΟΗΣ ΥΠΟΓΕΙΩΝ ΥΔΑΤΩΝ ΚΑΙ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΛΥΜΑΤΩΝ

ΚΡΕΜΙΖΗΣ Α. – ΒΑΪΟΠΟΥΛΟΣ Δ.

Τομέας Γεωγραφίας-Κλιματολογίας,
Πανεπιστήμιο Αθηνών, Πανεπιστημιούπολις, 157 84 Αθήνα

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Μαθηματικό μοντέλο ή πρότυπο είναι η παράσταση με μαθηματικούς τύπους μιας διαδικασίας ή ενός υπό μελέτη φυσικού συστήματος.

Η μαθηματική περιγραφή μιας φυσικής διαδικασίας καταλήγει σε μια μερική διαφορική εξίσωση που, εκτός ειδικών περιπτώσεων, δεν μπορεί να λυθεί άμεσα.

Η προσομοίωση ενός συστήματος με τους Η.Υ. απαιτεί τη χρήση αριθμητικών μεθόδων. Αυτές βασίζονται στο χωρισμό της περιοχής εξέτασης σ' ένα πεπερασμένο αριθμό βρόγχων (κυψελών). Οι πολύ γνωστές αριθμητικές μέθοδοι των πεπερασμένων διαφορών και των πεπερασμένων στοιχείων χρησιμοποιούνται ευρύτατα ως βάση για την προσομοίωση με Η.Υ. Αυτές καταλήγουν σ' ένα σύνολο N αλγεβρικών εξισώσεων με N αγνώστους. Η επίλυση αυτού μπορεί να γίνει με οποιαδήποτε μέθοδο απαλείψεως (elimination), ή με οποιαδήποτε μέθοδο χαλαρώσεως (relaxation).

Το πρόβλημα της υποβάθμισης της ποιότητας των υδάτων, επιφανειακών και υπόγειων, είναι σε όλους γνωστό. Οι επιστήμονες, που εμπλέκονται στην προστασία των υπογείων υδάτινων πόρων, αντιμετωπίζουν το πρόβλημα αναγνώρισης των μηχανισμών μεταφοράς των ρύπων εντός των συστημάτων ροής και ανάπτυξης αξιόπιστων προβλέψεων αυτής.

Οι φυσικές διεργασίες που ελέγχουν την μεταφορά διαλελυμένων ουσιών (λυμάτων) είναι η διαγωγή (advection) και η υδροδυναμική διασπορά (hydrodynamic dispersion). Οι χημικές διεργασίες προκαλούν αύξηση ή μείωση της μάζας του λύματος.

Η κύρια διαφορική εξίσωση που περιγράφει τη μεταφορά ενεργών διαλελυμένων ουσιών σε κορεσμένο ισότροπο πορώδες μέσο είναι γνωστή ως εξίσωση διαγωγής-διασποράς. Περιλαμβάνει τις φυσικές διεργασίες (διαγωγή-διασπορά) και τις χημικές διεργασίες (προσρόφηση-απεκρόφηση).

Τα παραπάνω στοιχεία χρησιμοποιούνται για την κατασκευή ενός λογισμικού για την προσομοίωση της υπόγειας ροής υδάτων και της μεταφοράς των λυμάτων σε κορεσμένους υδροφορείς.

ABSTRACT

A mathematical model is the mathematical description of a physical process that

results to a partial differential equation.

Digital computer simulation of physical systems requires the use of numerical methods. They are based on a discretization of the continuum into a finite number of blocks. The well known finite-difference and finite-element methods are widely used for the simulation. Both lead to a set of N algebraic equations with N unknowns. This system of equations can be solved by any elimination or iteration or relaxation method.

The problem of surface and underground water quality degradation has been evident for a long time. Scientists involved in the protection of groundwater resources are facing the problem of identifying the areas and mechanisms by which pollutants can enter groundwater flow systems and of developing reliable predictions for the transport of contaminants within the flow systems.

The physical processes that control the flux of solute are advection and hydrodynamic dispersion. Loss or gain of solute mass can occur as a result of chemical reactions.

The principal differential equation that describes transport of dissolved reactive constituents in saturated isotropic porous media is known as the advection-dispersion equation. The effects of physical processes (advection-dispersion) and chemical processes (adsorption-desorption) are included in this equation.

The above elements are the base used for the development of a programme for the simulation of underground water flow and solute transport in a saturated aquifer.

A. Προβλήματα Συναριακών (Οριακών) Τιμών (Π.Ο.Τ.)

Ένα πρόβλημα οριακών τιμών είναι ένα μαθηματικό μοντέλο. Η τεχνική ανάλυση αυτού είναι μια διαδικασία με 4 στάδια:

- (1) Εξέταση του φυσικού προβλήματος.
- (2) Αντικατάσταση του φυσικού προβλήματος από ένα ισοδύναμο μαθηματικό πρόβλημα.
- (3) Λύση του μαθηματικού προβλήματος με τις μαθηματικές τεχνικές.
- (4) Ερμηνεία των μαθηματικών αποτελεσμάτων σε σχέση με το φυσικό περιβάλλον.

Οι αλγόριθμοι για την προσεγγιστική αριθμητική επίλυση προβλημάτων οριακών τιμών για μερικές διαφορικές εξισώσεις εξαρτώνται από τον τύπο του προβλήματος και βασίζονται σε δύο καθιερωμένες μεθόδους, των πεπερασμένων στοιχείων και πεπερασμένων διαφορών.

Η λύση ενός προβλήματος οριακών τιμών με τις παραπάνω δύο μεθόδους ανάγεται τελικώς σε προβλήματα πινάκων, δηλαδή στη λύση ενός συνόλου γραμμικών εξισώσεων, ενός γραμμικού συστήματος.

Διακρίνονται δύο γενικές μέθοδοι αριθμητικής λύσης γραμμικών συστημάτων, οι

άμεσες και οι έμμεσες ή επαναληπτικές.

Στις άμεσες ανήκει η μέθοδος απαλοιφής του Gauss και η μέθοδος Choleski.

Στις έμμεσες ανήκουν οι μέθοδοι Jacobi και Gauss-Seidel.

Β. Π.Ο.Τ. στην Υπόγειο Ροή

Για να καθοριστεί πλήρως ένα πρόβλημα οριακών τιμών (δηλαδή ένα μαθηματικό μοντέλο) για υπόγεια ροή, πρέπει να είναι γνωστά:

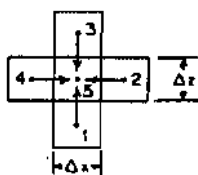
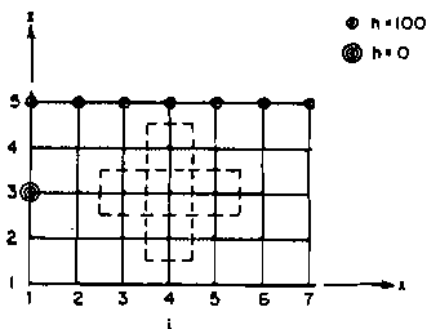
- Το μέγεθος και το σχήμα της περιοχής ροής.
- Η εξίσωση ροής εντός της περιοχής.
- Οι οριακές συνθήκες στα όρια της περιοχής.
- Οι αρχικές συνθήκες στην περιοχή (για ασταθή ροή).
- Η μερική κατανομή των υδρογεωλογικών παραμέτρων που ελέγχουν τη ροή και
- Μια μαθηματική μέθοδο λύσης.

Οι μέθοδοι λύσης χωρίζονται σε:

α) Λύση με αναλυτικές μαθηματικές τεχνικές (μερικές διαφορικές εξισώσεις ροής) και

β) Λύση με αριθμητικές μαθηματικές τεχνικές.

Οι αριθμητικές λύσεις είναι η βάση των σύγχρονων τεχνικών προσομοίωσης με υπολογιστές.

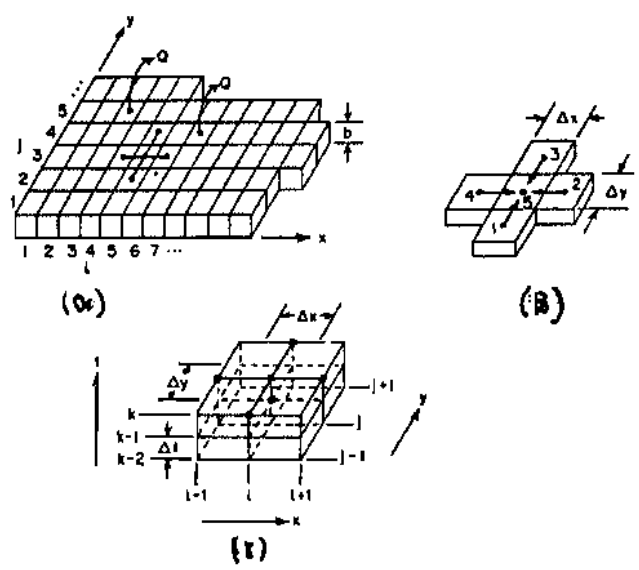


Εικ. 1. α) Κομβικό πλέγμα πεπερασμένου αριθμού βρόγχων για αριθμητική προσομοίωση δικτύου ροής. β) Εσωτερικός κόμβος (5) και οι γειτονικοί.

Β.1. Δίκτυο Ροής με Αριθμητική Προσομοίωση

Οι αριθμητικές μέθοδοι είναι προσεγγιστικές. Βασίζονται στο χωρισμό της περιοχής ροής σ' έναν πεπερασμένο αριθμό βρόγχων (εικ. 1α), ο καθένας με τις δικές του υδρογεωλογικές ιδιότητες και μ' έναν κόμβο στο κέντρο που καθορίζει το υδραυλικό φορτίο όλου του βρόγχου (εικ. 1β).

Οι αριθμητικές μέθοδοι των πεπερασμένων διαφορών και των πεπερασμένων στοιχείων χρησιμοποιούνται ευρύτατα ως βάση για την προσομοίωση με Η.Υ. της ροής σε υπόγειους υδροφορείς.



Εικ. 2. (α), (β), (γ). Διάκριση δικτύου προσομοίωσης ενός διδιάστατου οριζόντιου, υπό πίεση υδροφορέα, σταθερού πάχους b.

B.1.1. Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών

Ας θεωρήσουμε ένα διδιάστατο, οριζόντιο, υπό πίεση, υδροφορέα με σταθερό πάχος b και ας εφαρμόσουμε σ' αυτόν ένα δίκτυο πεπερασμένου αριθμού βρόγχων (εικ. 2α).

Η γενική εξίσωση πεπερασμένων διαφορών για έναν

εσωτερικό κόμβο σε ένα ετερογενές, ανισότροπο υδροφορέα ασταθούς ροής, και με τα παραπάνω χαρακτηριστικά είναι (εικ. 2β, γ):

$$Ah_{ij}^k = Bh_{i,j+1}^k + Ch_{i+1,j}^k + Dh_{i,j-1}^k + Eh_{i-1,j}^k + F \tag{B.1.1.a}$$

όπου (i,j) = κομβικό σημείο

k = 0, 1, 2, (χρονικό βήμα)

$$A = [(Tx)_{i+1,j} + 2[(Tx)_{i,j} + (Tx)_{i-1,j}] / 2\Delta x^2 + [(Ty)_{i,j+1} + 2[(Ty)_{i,j} + (Ty)_{i,j-1}] / 2\Delta y^2 + S_{ij} / \Delta t$$

$$B = [(Ty)_{i,j} + (Ty)_{i,j-1}] / 2\Delta y^2$$

$$C = [(Tx)_{i+1,j} + (Tx)_{i,j}] / 2\Delta x^2$$

$$D = [(Ty)_{i,j+1} + (Ty)_{i,j}] / 2\Delta y^2$$

$$E = [(Tx)_{i,j} + (Tx)_{i-1,j}] / 2\Delta x^2$$

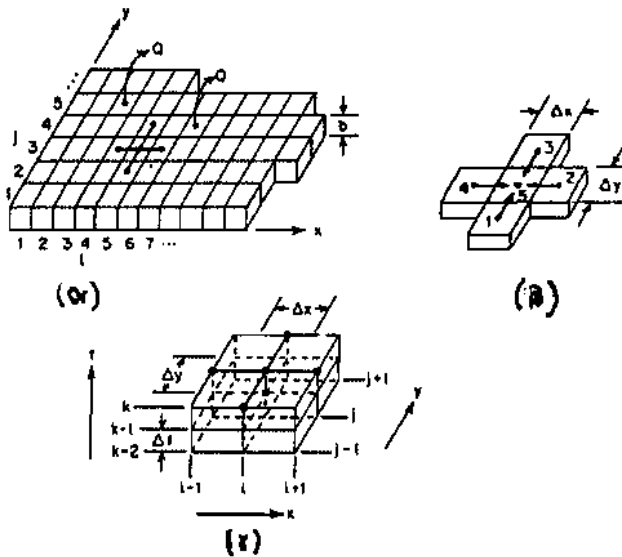
$$F = S_{ij} * h_{ij}^{k-1} / \Delta t$$

Tx, Ty = οι κύριες συνιστώσες, κατά την x και y διεύθυνση, του ανύσματος μεταβιβασιμότητας που ορίζεται ως T=Kb.

S = η υδαταποθηκευτικότητα που ορίζεται ως S=Ss*b.

Η εξίσωση (B11a) έχει γραφτεί σε σχέση με τις τιμές του υδραυλικού φορτίου σε πέντε κόμβους στο χρονικό βήμα k και ενός κόμβου στο χρονικό βήμα (k-1). Αυτή είναι γνωστή ως προσέγγιση της προς τα πίσω διαφοράς (backward-difference).

Οι Remson et al (1971) αναφέρουν ότι υπάρχουν μερικά υπολογιστικά πλεονεκτή-



Εικ. 2. (α), (β), (γ). Διάκριση δικτύου προσομοίωσης ενός διασπίσματος οριζόντιου, υπό πίεση υδροφορέα, σταθερού πάχους b.

Β.1.1. Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών

Ας θεωρήσουμε ένα διασπίσματο, οριζόντιο, υπό πίεση, υδροφορέα με σταθερό πάχος b και ας εφαρμόσουμε σ' αυτόν ένα δίκτυο πεπερασμένου αριθμού βρόγχων (εικ. 2α).

Η γενική εξίσωση πεπερασμένων διαφορών για έναν

εσωτερικό κόμβο σε ένα ετερογενές, ανισότροπο υδροφορέα ασταθούς ροής, και με τα παραπάνω χαρακτηριστικά είναι (εικ. 2β, γ):

$$A h_{ij}^k = B h_{i,j+1}^k + C h_{i+1,j}^k + D h_{i,j-1}^k + E h_{i-1,j}^k + F \quad (\text{B.1.1.a})$$

όπου (i,j) = κομβικό σημείο

k = 0, 1, 2, ... (χρονικό βήμα)

$$A = [(T_x)_{i+1,j} + 2 [(T_x)_{i,j} + (T_x)_{i-1,j}] / 2\Delta x^2 + [(T_y)_{i,j+1} + 2 [(T_y)_{i,j} + (T_y)_{i,j-1}] / 2\Delta y^2 + S_{ij} / \Delta t$$

$$B = [(T_y)_{i,j} + (T_y)_{i,j-1}] / 2\Delta y^2$$

$$C = [(T_x)_{i+1,j} + (T_x)_{i,j}] / 2\Delta x^2$$

$$D = [(T_y)_{i,j+1} + (T_y)_{i,j}] / 2\Delta y^2$$

$$E = [(T_x)_{i,j} + (T_x)_{i-1,j}] / 2\Delta x^2$$

$$F = S_{ij} * h_{ij}^{k-1} / \Delta t$$

T_x, T_y = οι κύριες συνιστώσες, κατά την x και y διεύθυνση, του ανύσματος μεταβιβασιμότητας που ορίζεται ως $T = Kb$.

S = η υδαταποθηκευτικότητα που ορίζεται ως $S = S_s * b$.

Η εξίσωση (B11a) έχει γραφτεί σε σχέση με τις τιμές του υδραυλικού φορτίου σε πέντε κόμβους στο χρονικό βήμα k και ενός κόμβου στο χρονικό βήμα (k-1). Αυτή είναι γνωστή ως προσέγγιση της προς τα πίσω διαφοράς (backward-difference).

Οι Remson et al (1971) αναφέρουν ότι υπάρχουν μερικά υπολογιστικά πλεονεκτή-

ματα στη χρήση της προσέγγισης κεντρικής διαφοράς (central difference), γνωστή και ως σχήμα Crank-Nicolson που χρησιμοποιεί τιμές φορτίου σε πέντε κόμβους στο χρονικό βήμα k και σε πέντε κόμβους στο χρονικό βήμα $k-1$.

Οι Pinder and Bredehoeft (1968), χρησιμοποίησαν την έμμεση μέθοδο εναλλασσόμενων διευθύνσεων (alternating-direction implicit procedure, ADIP) που συνεπάγεται δύο εξισώσεις πεπερασμένων διαφορών: μία στο επίπεδο x και μία στο επίπεδο y . Κάθε μία εξίσωση χρησιμοποιεί τιμές φορτίου σε τρεις κόμβους στο χρονικό βήμα k και σε τρεις κόμβους στο χρονικό βήμα $k-1$.

Εάν ο υδροφορέας είναι ομογενής και ισότροπος, τότε $T_x = T_y = T$ και $S_{i,j} = S$ για όλα τα (i,j) . Κάτω από αυτές τις συνθήκες και για ένα τετραγωνικό κομβικό πλέγμα με $\Delta x = \Delta y$, οι συντελεστές της παραπάνω εξίσωσης γίνονται:

$$A = \frac{S\Delta x^2}{T\Delta t} + 4\Delta x^2 \quad , \quad B = C = D = E = 1 \quad , \quad F = \frac{S\Delta x^2}{T\Delta t} * h_{i,j}^{k-1}$$

Οι παράμετροι S , T , Δx και Δt εντός των συντελεστών είναι γνωστές, όπως επίσης είναι γνωστή η τιμή του υδραυλικού φορτίου $h_{i,j}$ στο προηγούμενο χρονικό βήμα $k-1$. Για κόμβους σε οριακά σημεία, μερικοί από τους παραπάνω συντελεστές θα είναι μηδέν.

Για ένα εσωτερικό κόμβο όπου έχουμε άντληση ή τροφοδοσία, μόνο ο συντελεστής F αλλάζει και γίνεται:

$$F = \frac{\Delta x^2}{T} \left(\frac{S}{\Delta t} h_{i,j}^{k-1} + W_{i,j} \right) \quad \text{όπου} \quad W_{i,j} = \frac{Q_{i,j}}{\Delta x^2} - R_{i,j}$$

με τον πρώτο όρο του δεξιού σκέλους v' αντιπροσωπεύει την άντληση με παροχή Q και το δεύτερο όρο να αντιπροσωπεύει κατακόρυφες διαρροές προς τον υδροφόρα από υπερκείμενα ημιδιαπερατά στρώματα.

Στη σταθερή ροή, σε ομογενές και ισότροπο μέσο, ισχύει ότι το υδραυλικό φορτίο σε οποιοδήποτε κόμβο είναι ο μέσος όρος των τεσσάρων γειτονικών τιμών

$$h_{i,j} = 1/4 (h_{i,j-1} + h_{i+1,j} + h_{i,j+1} + h_{i-1,j})$$

Αυτή η εξίσωση είναι γνωστή ως εξίσωση πεπερασμένων διαφορών για τις συγκεκριμένες συνθήκες.

Εν συντομία, είναι δυνατή η ανάπτυξη μιας εξίσωσης πεπερασμένων διαφορών για κάθε κόμβο στο πλέγμα ακόμη και στα όρια. Εάν υπάρχουν N κόμβοι, τότε υπάρχουν N εξισώσεις με N αγνώστους (τις N τιμές του φορτίου h στους N κόμβους). Εάν το N ήταν μικρό θα μπορούσαμε να λύσουμε άμεσα τις εξισώσεις, χρησιμοποιώντας κάποια τεχνική όπως ο κανόνας του Cramer, αλλά επειδή συνήθως σε μια αριθμητική προσομοίωση το N είναι μεγάλο, χρησιμοποιείται μια πιο αποδοτική μέθοδος γνωστή ως χαλάρωση (relaxation).

Η χαλάρωση έγκειται σε επαναληπτικούς υπολογισμούς μέσα στο κομβικό δίκτυο από πάνω προς τα κάτω και από αριστερά προς τα δεξιά, εφαρμόζοντας τη σχετική

εξίσωση πεπερασμένων διαφορών σε κάθε κόμβο όπου το φορτίο είναι άγνωστο. Πρέπει στην αρχή να υποθεθεί μια αρχική τιμή φορτίου h σε κάθε κόμβο.

Κάθε πέρασμα από όλο το σύστημα λέγεται επανάληψη (iteration). Μετά από κάθε επανάληψη οι υπολογισθείσες h τιμές θα προσεγγίζουν περισσότερο τις τελικές λύσεις.

Η διαφορά στα φορτία h μεταξύ δύο διαδοχικών επαναλήψεων σε οποιοδήποτε κόμβο ονομάζεται υπόλειμμα (residual). Το μεγάλο υπόλειμμα στο σύστημα θα μειώνεται καθώς οι επαναλήψεις συνεχίζονται. Μια λύση έχει επιτευχθεί όταν το μέγιστο υπόλειμμα έχει μειωθεί κάτω από μια προκαθορισμένη τιμή ανοχής (tolerance).

Η μέθοδος της χαλάρωσης (ονομάστηκε έτσι από τους Shaw & Southwell, 1941) έχει αρκετά ψευδώνυμα. Είναι διαφορετικά γνωστή ως μέθοδος Gauss-Seidel, μέθοδος Liebmann και μέθοδος των διαδοχικών εκτοπίσεων (successive displacements).

Είναι η απλούστερη και από τις λιγότερο αποτελεσματικές, μεταξύ διαφόρων μεθόδων για τη λύση του συστήματος των εξισώσεων πεπερασμένων διαφορών. Για παράδειγμα, εάν το υπολογισμένα φορτία κατά την χαλάρωση διορθώνονται σύμφωνα με τον τύπο

$$h_{\text{corr}}^k = \omega h^k + (1-\omega) h_{\text{corr}}^{k-1}$$

όπου h_{corr}^{k-1} είναι το υπολογισμένο φορτίο κατά την K -επανάληψη και είναι το διορθωμένο φορτίο από την προηγούμενη επανάληψη, τότε η μέθοδος λέγεται διαδοχική υπερχαλάρωση (successive overrelaxation) και ο αριθμός των επαναλήψεων που απαιτούνται για την επίτευξη ικανοποιητικής λύσης μειώνεται σημαντικά. Η παράμετρος ω είναι γνωστή ως παράμετρος υπερχαλάρωσης και πρέπει να έχει εύρος $1 < \omega < 2$.

Γ. Λειτουργίες Μεταφοράς Διαλυμένων Ουσιών (Λυμάτων)

Γ.1. Φυσικές Λειτουργίες

Οι φυσικές λειτουργίες που ελέγχουν τη ροή λυμάτων είναι η διαγωγή (advection) και η υδροδυναμική διασπορά.

Η διασπορά είναι η συνιστώσα της μεταφοράς που οφείλεται στην κίνηση ροής του υπόγειου ύδατος και ισούται ποσοτικώς με τη μέση γραμμική ταχύτητα του ύδατος. Εάν η διαγωγή ήταν ο μόνος μηχανισμός μεταφοράς, τότε χημικώς ουδέτερα λύματα θα μεταφέρονταν από το ρευστό με πιστονική (σφηνοειδή) μετακίνηση. Ο όρος διαγωγή συνοντάται και ως μεταγωγή (convection) κυρίως σε περιπτώσεις όπου έχουμε και θερμική μεταφορά.

Η υδροδυναμική διασπορά είναι το φαινόμενο εξάπλωσης του λύματος έξω από την τροχιά που θα αναμένετο να ακολουθήσει σύμφωνα με την υδραυλική διαγωγή του συστήματος ροής. Η υδροδυναμική διασπορά εμφανίζεται ως αποτέλεσμα της μηχανικής μίξης κατά τη διαγωγή του ρευστού και λόγω μοριακής διάχυσης εξ αιτίας

της θερμοκινητικής ενέργειας των μορίων του λύματος και προκαλεί τη διάλυση αυτού.

Η μηχανική μίξη ή μηχανική διασπορά αφείλεται στις διαφορετικές μικροσκοπικές ταχύτητες α) εντός κάθε πόρου-καναλιού λόγω τριβών με την επιφάνεια των πόρων β) μεταξύ δυο διαδαχικών καναλιών λόγω διαφορετικών μεγεθών των πόρων και γ) λόγω του τρόπου διακλάδωσης και διασύνδεσης των πόρων.

Η μοριακή διάχυση είναι μια διαδικασία διασποράς σημαντική μόνο σε μικρές ταχύτητες και εμφανίζεται μόνο σε διαφορές συγκέντρωσης.

Η μηχανική διασπορά κατά την εγκάρσια διεύθυνση είναι παλύ αργή λειτουργία σε σχέση με τη διασπορά κατά τη διαμήκη διεύθυνση, αλλά σε μικρές ταχύτητες όπου η μοριακή διάχυση είναι ο κυρίαρχος μηχανισμός, οι συντελεστές της διαμήκουσ και της εγκάρσιας διασποράς είναι σχεδόν ίσοι.

Γ.1.1. Μαθηματική περιγραφή των Φυσικών Λειτουργιών. Εξισώσεις Διαγωγής - Διασποράς

Η εξίσωση Διαγωγής-Διασποράς για μεταφορά λύματος σε κορεσμένο πορώδες μέσο είναι η:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} (D_x \frac{\partial C}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (D_y \frac{\partial C}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (D_z \frac{\partial C}{\partial z}) \right] - \left[\frac{\partial}{\partial x} (\bar{u}_x C) + \frac{\partial}{\partial y} (\bar{u}_y C) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{u}_z C) \right] = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (\Gamma.1.1.a)$$

όπου D_x, D_y, D_z είναι οι συντελεστές διασποράς στις διευθύνσεις x, y, z .

Σε ομογενές μέσο όπου η μέση γραμμική ταχύτητα u είναι σταθερή και ομοίμορφη (δηλ. δεν μεταβάλλεται χωροχρονικά), οι συντελεστές διασποράς D_x, D_y, D_z δεν μεταβάλλονται στο χώρο, οπότε η εξ. (Γ11α) γίνεται:

$$\left[D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] - \left[\bar{u}_x \frac{\partial C}{\partial x} + \bar{u}_y \frac{\partial C}{\partial y} + \bar{u}_z \frac{\partial C}{\partial z} \right] = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (\Gamma.1.1.\beta)$$

Στη μία διάσταση, είναι:

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \bar{u}_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (\Gamma.1.1.\gamma)$$

Σε μερικές εφαρμογές, η μονοδιάστατη διεύθυνση θεωρείται ως μια συντεταγμένη κατά τη διεύθυνση ροής, κατά μήκος μιας γραμμής ροής. Η εξίσωση μεταφοράς γίνεται τότε:

$$D_l \frac{\partial^2 C}{\partial l^2} - \bar{u}_l \frac{\partial C}{\partial l} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (\Gamma.1.1.\delta)$$

όπου l = η συντεταγμένη διεύθυνση κατά μήκος της γραμμής ροής

u = η μέση γραμμική ταχύτητα κατά μήκος της γραμμής ροής

D_l = ο διαμήκης συντελεστής υδροδυναμικής διασποράς.

Για ένα δισδιάστατο πρόβλημα, είναι δυνατό να καθοριστούν δύο διευθύνσεις συντεταγμένων, S_l και S_t , όπου η S_l είναι κατά μήκος της γραμμής ροής και η S_t είναι κάθετη στην προηγούμενη. Η εξίσωση μεταφοράς γίνεται:

$$D_l \frac{\partial^2 C}{\partial S_l^2} + D_t \frac{\partial^2 C}{\partial S_t^2} - \bar{u}_l \frac{\partial C}{\partial S_l} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (\Gamma.1.1.ε)$$

όπου D_l και D_t είναι οι συντελεστές διασποράς κατά τη διαμήκη και εγκάρσια διεύθυνση, αντίστοιχα.

Εάν η u μεταβάλλεται κατά μήκος της γραμμής ροής και οι D_l και D_t μεταβάλλονται στο χώρο, τότε η εξ. (Γ11ε) γίνεται:

$$\frac{\partial C}{\partial S_l} \left(D_l \frac{\partial C}{\partial S_l} \right) + \frac{\partial C}{\partial S_t} \left(D_t \frac{\partial C}{\partial S_t} \right) - \frac{\partial}{\partial S_l} (\bar{u}_l C) = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (\Gamma.1.1.στ)$$

Οι εξισώσεις (Γ11α) έως (Γ11στ) αντιπροσωπεύουν έξι μορφές της εξίσωσης διαγωγής – διασποράς (μεταφοράς). Η λύση οποιασδήποτε από αυτές παρέχει τη συγκέντρωση του λύματος C σε συνάρτηση με το χώρο και το χρόνο και θα έχει τη μορφή:

$C(x, y, z, t)$ για τις εξ. (Γ11α) και (Γ11β) και

$C(S_l, S_t, t)$ για τις εξ. (Γ11ε) και (Γ11στ).

Γ.1.2. Αριθμητική Προσομοίωση

Μια αριθμητική προσομοίωση του μοντέλου της κατανομής του ρύπου χρησιμοποιώντας μια προσέγγιση της εξίσωσης (Γ11στ) με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων έχει περιγραφεί από τους Pickens and Lennox (1976).

Αλλα αριθμητικά μοντέλα έχουν αναπτυχθεί από τους Bredenhoeft and Pinder (1973), και Schwartz (1975).

Γ.2. Χημικές Αεπουργίες

Μεταβολές στη συγκέντρωση του λύματος μπορεί να εμφανισθούν ως αποτέλεσμα χημικών αντιδράσεων που λαμβάνουν χώρα, είτε εξ ολοκλήρου εντός της υγρής φάσης, είτε λόγω μετατροπής του λύματος σε ή από άλλες φάσεις όπως η στερεή φάση του πορώδους μέσου ή η αέρια φάση στην ακόρεστη ζώνη.

Οι μυριάδες των χημικών και βιοχημικών αντιδράσεων που μπορούν ν' αλλάξουν τις συγκεντρώσεις του λύματος στα υπόγεια συστήματα ροής ύδατος ομαδοποιούνται σε έξι κατηγορίες:

- i) Αντιδράσεις προσρόφησης-απεκρόφησης
- ii) Αντιδράσεις οξέων-βάσεων
- iii) Αντιδράσεις καθίζησης διαλύματος
- iv) Αντιδράσεις οξειδο-αναγωγικές
- v) Αντιδράσεις ιοντανταλλακτικές και
- vi) συνθέσεις μικροβιακών κυττάρων.

Για τον καθορισμό της κλασμάτωσης του λύματος μεταξύ της υγρής και της στερεής φάσης υπάρχουν τέσσερις τρόποι προσέγγισης:

- i) Χρήση υπολογιστικών προτύπων που βασίζονται σε θερμοδυναμικής προελεύσεως σταθερές ή συντελεστές για συστήματα ισορροπίας.
- ii) Εργαστηριακά πειράματα όπου το διάλυμα αντιδρά υπό ελεγχόμενες συνθήκες με δείγματα από το προς μελέτη γεωλογικό υλικό.
- iii) Πειράματα πεδίου *in situ* όπου ο βαθμός κλασμάτωσης καθορίζεται κατά τη διέλευση του διαλύματος μέσω ενός μικρού τμήματος του συστήματος υπόγειου ύδατος, και
- iv) Μελέτες περιοχών όπου έχει ήδη εμφανισθεί πρόβλημα μόλυνσης του υδροφόρου ορίζοντα.

Στο εργαστήριο (ii) ο βαθμός κλασμάτωσης των λυμάτων μεταξύ της ρευστής και της στερεής φάσης σ' ένα πορώδες μέσο καθορίζεται με τα λεγόμενα πειράματα κυλινδρικών στηλών (*column experiments*) και με τα ομαδικά πειράματα (*batch experiments*). Η κλασμάτωση, όπως καθορίζεται από αυτά τα εργαστηριακά πειράματα, εκφράζεται συνήθως με μια γραφική παράσταση της μάζας S (που προσροφήθηκε ανά μονάδα μάζας του στερεού υλικού) συναρτήσει της συγκέντρωσης C του διαλύματος. Αυτή η γραφική παράσταση και οι αντίστοιχες μαθηματικές εξισώσεις είναι γνωστές ως ισόθερμες. Λέγονται έτσι από το γεγονός ότι τα πειράματα πραγματοποιούνται σε σταθερή θερμοκρασία.

Η πιο άμεση αλλά σπανίως βολική μέθοδος καθορισμού της κλασμάτωσης και της καθυστέρησης του ρύπου είναι οι επί τόπου δοκιμές πεδίου (iii). Οι δοκιμές αυτού του τύπου είναι χρονοβόρες κοστίζουν αρκετά και πρέπει να γίνουν πολλαπλά πειράματα για να έχουμε επαρκή στοιχεία. Το αντιστάθμισμα όμως του κόπου είναι οι αξιόπιστες πληροφορίες πάνω στη συμπεριφορά ενός ρύπου.

Γ.3. Μαθηματική Περιγραφή των Φυσικο-Χημικών Λειτουργιών

Γ.3.1. Μετοφορά με Ρόφηση (Προσρόφηση-Απεκρόφηση)

Για καθυστέρηση λόγω της προσρόφησης, η εξίσωση μεταφοράς (Γ11δ), σ' ένα ομογενές κορεσμένο μέσο σε μονοδιάστατο σύστημα σταθερής ροής, κατά μήκος της διεύθυνσης ροής παίρνει τη μορφή

$$D_1 \frac{\partial^2 C}{\partial l^2} - \bar{v}_1 \frac{\partial C}{\partial l} + \frac{\rho_b}{n} \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (\Gamma.3.1.a)$$

όπου ρ_b είναι η πυκνότητα του πορώδους μέσου είναι το πορώδες και S είναι η μάζα του χημικού συστατικού που προσροφήθηκε στη μοναδιαία μάζα του στερεού μέρους του πορώδους μέσου.

Ο πρώτος όρος της εξ. (Γ31α) είναι ο όρος της διασποράς, ο δεύτερος είναι ο όρος της διαγωγής και ο τρίτος είναι ο όρος των χημικών αντιδράσεων και αντιπροσωπεύει την αλλαγή της συγκέντρωσης μέσα στο ρευστά που προκαλείται από την προσρόφηση ή την απεκρόφηση.

Η διαδικασία της προσρόφησης μπορεί να παρουσιαστεί ως ένα φαινόμενο ισορροπίας (σταθερό, ανεξάρτητο χρόνου) ή ως ένα φαινόμενο ανισορροπίας (κινητικό, οσταθές, χρονοεξαρτώμενο).

Η ισόρροπη προσρόφηση προϋποθέτει ότι ο βαθμός προσρόφησης είναι σχετικό σταθερός και ότι η χρήση μιας έκφρασης στιγμιαίας προσρόφησης είναι δικαιολογημένη.

Εάν οι αντιδράσεις που προκαλούν την κλασμάτωση είναι στιγμιαίες και αναστρέψιμες και εάν η ισόθερμη είναι γραμμική, τότε η κλασμάτωση μεταξύ της υγρής και της στερεής φάσης αντιπροσωπεύεται από το συντελεστή κατανομής K_d , διαφορετικά γνωστός και ως συντελεστής κλασμάτωσης Freundlich ($K_d = dS/dC$).

Αυτή η παράμετρος χρησιμοποιείται ευρύτατα στις μελέτες υπόγειας ρύπανσης, αφού πολλοί ρύποι πληρούν τις παραπάνω προϋποθέσεις. Υπό αυτές τις συνθήκες η καθυστέρηση του μετώπου του ρύπου σε σχέση με την μάζα του ύδατος περιγράφεται από τον τύπο

$$\frac{\bar{u}}{u_c} = 1 + \frac{\rho_b}{\pi} * K_d = Rf \quad (\Gamma.3.1.\beta)$$

όπου u είναι η μέση γραμμική ταχύτητα του υπόγειου ύδατος, και u_c είναι η ταχύτητα του καθυστερημένου ρύπου στο σημείο όπου $C/C_0=0.5$.

Η εξίσωση (Γ31β) είναι γνωστή ως εξίσωση καθυστέρησης. Το δεύτερο μέλος αυτής αναφέρεται ως παράγοντας καθυστέρησης Rf .

Γνωρίζοντας το συντελεστή κλασμάτωσης του ρύπου, την πυκνότητα και το πορώδες του μέσου, μπορεί να εφαρμοσθεί ένας συντελεστής καθυστέρησης για να μειωθεί η ταχύτητα διάδοσης του ρύπου.

Όταν χρησιμοποιείται ο συντελεστής κατανομής K_d για να καθοριστεί η καθυστέρηση του ρύπου, υποτίθεται ότι οι αντιδράσεις κλασμάτωσης είναι πολύ γρήγορες σε σχέση με το βαθμό κίνησης του υπόγειου νερού, δηλαδή έχουμε ισόρροπη προσρόφηση. Πολλά συστατικά όμως, δεν αντιδρούν αρκετά γρήγορα με το πορώδες μέσο (ανισόρροπη προσρόφηση), με αποτέλεσμα να εμφανίζονται αποκλίσεις.

Σε μελέτες πεδίου η εξίσωση καθυστέρησης χρησιμοποιείται συχνά λόγω της απλότητάς της. Αυτό μπορεί να οδηγήσει σε σοβαρά σφάλματα πρόβλεψης της μετακίνησης των ρύπων σε συστήματα ανισορροπίας (κινητικά, χρονοεξαρτώμενα). Οι σχέσεις ισορροπίας απαιτούν λιγότερα δεδομένα εισόδου και οι εξισώσεις που προκύπτουν είναι απλούστερες προς λύση. Οι πιο πολύπλοκες σχέσεις ανισορροπίας απαιτούν περισσότερο χρόνο και μνήμη στον υπολογιστή.

Γ.3.2. Μετοφορά με αποδόμηση

Για πολυάριθμα οργανικά προϊόντα η αποδόμηση φαίνεται να υπακούει σ' έναν κινητικό νόμο πρώτης τάξης. Η συγκέντρωση του λύματος είναι μια εκθετική συνάρτηση φθίνουσα με το χρόνο

$$m(t) = m_0 e^{-at}$$

όπου m_0 η αρχική μάζα του ρύπου

$m(t)$ η μάζα του ρύπου σε χρόνο t

a σταθερά αποδόμησης.

Η αποδόμηση μπορεί εξ ίσου να εκφρασθεί με τη μορφή:

$m(t) = m_0 (0.5)^{t/t_{1/2}}$ όπου $t_{1/2}$ είναι ο χρόνος ημιζωής (διάρκεια χρόνου απαραίτητη για την αποδόμηση του ημίσεως της μάζας του λύματος).

Δ. ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΟΣ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ

Τα προηγούμενα, χρησιμοποιούνται ως βάση για την ανάπτυξη ενός λογισμικού (software) για ηλεκτρονικό υπολογιστή που επιτρέπει να μελετηθεί η εξάπλωση διαλυμένων ουσιών στα υπόγεια ύδατα.

Οι κυριότεροι τομείς εφαρμογής του λογισμικού είναι:

- Μελέτη μόλυνσης στιγμιαίας ή συνεχόμενης.
- Πρόβλεψη της έκτασης της μόλυνσης κατά την επίγεια ή υπάγεια αποθήκευση ουσιών.
- Προσδιορισμός της περιμετρικής προστασίας σε άντληση ύδατος.

Το λογισμικό υποστηρίζει την έκδοση χαρτών συγκεντρώσεων συναρτήσεων του χρόνου και τη σχεδίαση των γραμμών ροής.

Τα μοντέλο αυτό, έχει τα εξής χαρακτηριστικά:

- Δισδιάστατη ροή.
- Σταθερό ή οσταθές υδροδυναμικό καθεστώς.
- Ανισότροπος υδροφορέας ελεύθερος ή υπό πίεση.
- Διάκριση της περιοχής μέσω ενός ορθογώνιου μεταβλητού δικτύου.
- Υπολογισμός του δικτύου ροής.
- Εξέλιξη της συγκέντρωσης συναρτήσεων του χρόνου σε οποιοδήποτε σημείο.

Το λογισμικό επιτρέπει την παρουσίαση της εξάπλωσης ενός λύματος, λαμβάνοντας υπόψη τα φαινόμενα της διαγωγής, διασποράς, γραμμικής προσρόφησης (μέσω ενός συντελεστή καθυστέρησης), και αποδόμησης (μέσω ενός χρόνου ημι-ζωής) σε σταθερό ή ασταθές πεδίο ροής.

Ο τομέας μελέτης διακρίνεται σε βρόγχους τετράγωνους ή ορθογώνιους. Στο κέντρο κάθε βρόγχου θεωρείται ως γνωστή η πιεζομετρία καθώς επίσης μια τιμή διαπερατότητας και η διανομή των υδραυλικών κλίσεων του υδροφόρου ορίζοντα. Από αυτά είναι δυνατός ο υπολογισμός της μέσης ταχύτητας του ύδατος, γνωρίζοντας και το ενεργό πορώδες του μέσου.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- BREDEHOEFT, J.D., & G.F. PINDER. 1973. Mass transport in flowing groundwater. *Water Resources Res.*, 9, pp. 194-209.
- EBACK, E.A., & R.R. WHITE. 1958. Mixing of fluids flowing through beds of packed solids. *Amer. Inst. Chem. Eng. J.*, 4, no. 2.
- OGATA, A. 1970. Theory of dispersion in a granular medium. *U.S. Geol. Surv. Prof. Paper* 411-I.
- OGATA, A., & R.B. BANKS. 1961. A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media *U.S. Geol. Surv. Prof. Paper* 411-A.
- PICKENS, J.F., & W.C. LENNOX. 1976. Numerical simulation of waste movement in steady groundwater flow systems. *Water Resources Res.*, 12, no. 2, pp. 171-180.
- PINDER, G.F., & J.D. BREDEHOEFT. 1968. Application of the digital computer for aquifer evaluation. *Water Resources Res.*, 4, pp. 1069-1093.
- PRICKETT T.A., NAYMIK T.G. et LONNQOUIST C.G. (1981). A «Random walk» solute transport model for selected groundwater quality evaluations. *Illinois State Water Survey, Bull.* 65, 103p.
- REMSON, I., G.M. HORNBERGER, & F.J. MOLZ. 1971. *Numerical Methods in Subsurface Hydrology*. Wiley-Interscience, New York.
- RICHARDS, L.A. 1931. Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics*, 1, pp. 318-333.
- SHAW, F.S., & R.V. SOUTHWELL. 1941. Relaxation methods applied to engineering problems: VII. Problems relating to the percolation of fluids through porous materials. *Proc. Roy. Soc. Lond.*, A 178, pp. 1-17.
- SCHWARTZ, F.W. 1975. On radioactive waste management: an analysis of the parameters controlling subsurface contaminant transfer. *J. Hydrol.*, 27, pp. 51-71.