



Jerzy M. Sawicki

**MIGRACJA
ZANIECZYSZCZEŃ**

Wydawnictwo PG

PRZEWODNICZĄCY KOMITETU REDAKCYJNEGO
WYDAWNICTWA POLITECHNIKI GDAŃSKIEJ

Romuald Szymkiewicz

REDAKTOR PUBLIKACJI NAUKOWYCH

Janusz T. Cieśliński

RECENZENCI

Paweł Rowiński

Romuald Szymkiewicz

PROJEKT OKŁADKI

Katarzyna Olszonowicz

Wydanie I – 2003

Wydano za zgodą
Rektora Politechniki Gdańskiej

Wydawnictwa PG można nabywać w Księgarni PG (Gmach Główny, I piętro)
i zamawiać faksem, pocztą elektroniczną lub listownie pod adresem:
Wydawnictwo Politechniki Gdańskiej
ul. G. Narutowicza 11/12, 80–952 Gdańsk, tel./fax 058 347 16 18
e-mail: wydaw@pg.gda.pl, www.pg.gda.pl/WydawnictwoPG

© Copyright by Wydawnictwo Politechniki Gdańskiej
Gdańsk 2007

Utwór nie może być powielany i rozpowszechniany, w jakiegokolwiek formie
i w jakikolwiek sposób, bez pisemnej zgody wydawcy

ISBN 83–7348–193–0

SPIS TREŚCI

Wykaz ważniejszych oznaczeń	9
Część I. UKŁADY NIEJEDNORODNE	15
1. MIGRACJA ZANIECZYSZCZEŃ JAKO ZAGADNIENIE MECHANIKI PŁYNÓW NIEJEDNORODNYCH	15
2. CHARAKTERYSTYKA PŁYNÓW NIEJEDNORODNYCH	20
2.1. Molekularna budowa materii	20
2.1.1. Uwagi ogólne	20
2.1.2. Skala elementarna i skala makroskopowa	20
2.1.3. Molekularny model gazu	21
2.1.4. Molekularny model cieczy	23
2.1.5. Molekularny model ciała stałego	23
2.1.6. Pojęcie płynności	23
2.1.7. Model ośrodka ciągłego	24
2.1.8. Układy proste i układy złożone	24
2.1.9. Energia cieplna	26
2.1.10. Zmiany stanu skupienia. Rozpuszczalność	26
2.2. Wielkości fizyczne, charakteryzujące układy niejednorodne	29
2.2.1. Uwagi ogólne	29
2.2.2. Metody opisu wielkości fizycznych	29
2.2.3. Bazowe wielkości fizyczne	31
2.2.4. Prędkość mieszaniny	31
2.2.5. Ciśnienie	33
2.2.6. Gęstość i stężenie	34
2.2.7. Temperatura	36
3. METODY OPISU RUCHU MIESZANINY	37
3.1. Możliwości formalne	37
3.2. Metoda fenomenologiczna	37
3.3. Metoda strukturalna	38
Część II. METODA FENOMENOLOGICZNA	40
4. KONTYNUALNY MODEL MIGRACJI ZANIECZYSZCZEŃ	40
4.1. Prawa fizyczne, wykorzystywane w metodzie fenomenologicznej	40
4.2. Równania zachowania dla układów niejednorodnych	41
4.2.1. Równanie zachowania masy dla dowolnego składnika mieszaniny	41
4.2.2. Równanie zachowania masy mieszaniny	44
4.2.3. Równanie zachowania pędu dla dowolnego składnika mieszaniny	46
4.2.4. Równanie zachowania pędu mieszaniny	49
4.2.5. Równanie zachowania momentu pędu dla substancji niejednorodnej	50
4.2.6. Równanie zachowania energii dla dowolnego składnika mieszaniny	51
4.2.7. Równanie zachowania energii dla mieszaniny	52
4.3. Zestawienie i wstępne uproszczenie ogólnych równań zachowania	53
Przykład 4.1	56
4.4. Równania konstytutywne	58
4.4.1. Uwagi ogólne	58
4.4.2. Prawo Ficka	59

4.4.2.1. Treść prawa i jego interpretacja	59
4.4.2.2. Współczynnik dyfuzji molekularnej dla substancji rozpuszczonej	61
4.4.2.3. Współczynnik dyfuzji molekularnej dla zawiesin	63
4.4.2.4. Termodyfuzja	63
4.4.3. Prawo Fouriera	64
4.4.3.1. Sformułowanie i interpretacja prawa	64
4.4.3.2. Współczynnik molekularnego przewodzenia ciepła	66
4.4.4. Prawo Newtona	67
4.4.4.1. Pojęcie naprężenia	67
4.4.4.2. Równanie konstytutywne i jego interpretacja	67
4.4.4.3. Współczynnik lepkości roztworu	70
4.4.4.4. Współczynnik lepkości zawiesiny	74
4.4.5. Równanie kaloryczne	74
4.4.6. Bilans równań konstytutywnych	75
4.5. Równanie stanu	76
4.5.1. Uwagi wstępne	76
4.5.2. Wyprowadzenie równania stanu dla cieczy niejednorodnej	77
4.5.2.1. Kontrakcja	77
4.5.2.2. Rozszerzalność cieplna cieczy	78
4.5.2.3. Ścisłość cieczy	79
4.5.2.4. Równanie stanu dla cieczy niejednorodnej	79
Przykład 4.2	79
4.6. Ruch względny rozpuszczalnika	81
4.7. Bazowy układ równań metody fenomenologicznej	82
4.8. Praktyczne wersje układu bazowego	84
4.9. Uprozczone wyprowadzenie praktycznych równań transportu	87
4.9.1. Uwagi wstępne	87
4.9.2. Podstawowe założenia modelu	87
4.9.3. Równanie zachowania masy <i>i</i> -tego składnika roztworu	88
4.9.4. Prawo Ficka	90
4.9.5. Równanie adwekcji-dyfuzji ze źródłami	91
4.9.6. Równanie przewodnictwa cieplnego	91
4.10. Funkcje źródłowe	92
4.10.1. Uwagi ogólne	92
4.10.2. Kinetyka procesów	93
Przykład 4.3	95
4.10.3. Funkcje źródłowe w inżynierii środowiska	96
4.10.3.1. Uwagi ogólne	96
4.10.3.2. Natlenianie wody	97
4.10.3.3. Mineralizacja substancji organicznych	103
4.10.3.4. Fotosynteza	105
4.10.3.5. Nitryfikacja	106
4.10.3.6. Przyrost i ubytek mikroorganizmów	107
4.10.3.7. Separacja grawitacyjna	107
4.10.3.8. Adsorpcja	109
4.10.3.9. Pobór tlenu przez osady denne	109
4.10.3.10. Inne funkcje źródłowe	110
4.10.3.11. Źródła punktowe	110
4.11. Formułowanie zagadnień	112
4.11.1. Wprowadzenie	112
4.11.2. Układ i jego własności	112

4.11.3. Warunki początkowe	115
4.11.4. Warunki brzegowe	116
4.11.4.1. Sformułowanie ogólne	116
4.11.4.2. Praktyczne określanie warunku Dirichleta	118
4.11.4.3. Praktyczne określanie warunku Neumanna	122
4.11.4.4. Praktyczne określanie warunku Hankela	123
4.11.4.5. Warunki mieszane	126
4.11.4.6. Warunki zgodności	127
4.12. Rozwiązywanie zagadnień	128
4.12.1. Klasyfikacja metod	128
4.12.2. Dokładne rozwiązania analityczne	128
4.12.2.1. Uwagi ogólne	128
4.12.2.2. Jednoczłonowe wersje równania ogólnego	128
Przykład 4.4	129
Przykład 4.5	130
4.12.2.3. Dwuczłonowe wersje równania ogólnego – stany nieustalone	131
Przykład 4.6	134
4.12.2.4. Dwuczłonowe wersje równania ogólnego – stany ustalone	136
Przykład 4.7	137
Przykład 4.8	137
Przykład 4.9	138
4.12.2.5. Trójczłonowe wersje równania ogólnego	141
4.12.2.6. Pełna wersja równania ogólnego	142
4.12.2.7. Inne analityczne rozwiązania równania transportu	143
4.12.2.8. Uwagi praktyczne o analitycznych rozwiązaniach równania transportu zanieczyszczeń	145
4.12.3. Przybliżone metody analityczne	145
4.12.4. Metody numeryczne	146
4.12.5. Metody graficzne	146
5. UPRASZCZANIE RÓWNAŃ METODY FENOMENOLOGICZNEJ	149
5.1. Metodyka upraszczania równań	149
5.2. Bezwymiarowa postać równania transportu masy	150
Przykład 5.1	154
5.3. Bezwymiarowa postać równania przewodzenia ciepła	155
6. BURZLIWY TRANSPORT MASY I ENERGII	157
6.1. Przepływ burzliwy	157
6.1.1. Charakterystyka zjawiska	157
6.1.2. Równania Reynoldsa	159
6.1.3. Modele turbulencji	160
6.1.4. Współczynnik lepkości turbulentnej	163
6.1.4.1. Uwagi ogólne	163
6.1.4.2. „Zerównaniowe” modele turbulencji	163
6.1.4.3. „Jednorównaniowe” modele turbulencji	165
6.1.4.4. „Dwurównaniowe” modele turbulencji	166
6.2. Dyfuzja burzliwa	166
6.2.1. Przekształcenie równań transportu	166
6.2.2. Prawo Ficka dla ruchu turbulentnego	168
6.2.3. Współczynnik dyfuzji burzliwej	170
6.2.3.1. Zasada wyznaczania współczynnika	170
6.2.3.2. Anizotropia dyfuzji burzliwej	171
6.2.3.3. Wzory praktyczne dla przepływów jednokierunkowych	173
6.2.3.4. Ogólny przypadek izotropii poprzecznej	177

6.2.3.5. Dyfuzja burzliwa w przypadku izotropowym	179
6.2.3.6. Wyznaczanie współczynnika dyfuzji burzliwej na podstawie pomiarów	180
6.2.4. Zestawienie roboczych wersji równania burzliwej dyfuzji	181
6.3. Burzliwa wymiana ciepła	182
6.3.1. Przekształcenie równania przewodzenia ciepła	182
6.3.2. Prawo Fouriera dla ruchu turbulentnego	183
6.3.3. Współczynnik turbulentnego wyrównywania temperatury	183
6.3.4. Robocze wersje równania burzliwego przewodzenia ciepła	184
6.4. Równanie burzliwego transportu wielkości skalarnej	184
6.5. Migracja zanieczyszczeń w ruchu turbulentnym	185
6.5.1. Sposób formułowania zagadnienia	185
6.5.2. Rozwiązywanie zagadnień	185
6.5.2.1. Uwagi ogólne	185
6.5.2.2. Rozwiązania analityczne	185
6.5.2.3. Uproszczony model ustalonego zrzutu zanieczyszczeń w obszarze nieograniczonym	186
6.5.2.4. Metoda odbić zwierciadlanych	188
6.5.2.5. Metody numeryczne	191
6.5.2.6. Wpływ efektów numerycznych na rozwiązanie równania migracji zanieczyszczeń	191
Przykład 6.1	193
Przykład 6.2	195
6.5.3. Strefy mieszania zanieczyszczeń	197
6.5.4. Wyloty kanalizacyjne	204
7. DYSPERSJA MASY I ENERGII	208
7.1. Omówienie pojęcia dyspersji	208
7.1.1. Uwagi ogólne	208
7.1.2. Dyspersja podłużna	209
7.1.3. Dyspersja płaska	211
7.1.4. Pojęcie dyspersji a przebieg procesu migracji zanieczyszczeń	212
7.2. Ilościowy opis dyspersji podłużnej	215
7.2.1. Przekształcenie równań ogólnych	215
7.2.2. Wyznaczenie dyspersyjnych strumieni masy i energii	218
7.2.2.1. Ruch laminarny w przewodzie kołowym	218
7.2.2.2. Ruch turbulentny w przewodzie kołowym	221
7.2.2.3. Prawo Ficka dla dyspersji podłużnej	222
7.2.2.4. Współczynnik dyspersji podłużnej	223
7.2.3. Równanie nieustalonej adwekcji-dyspersji – przypadek jednowymiarowy	224
7.2.4. Formułowanie zagadnień praktycznych	225
7.2.5. Rozwiązywanie zagadnień praktycznych	226
Przykład 7.1	226
7.3. Ilościowy opis dyspersji w płaszczyźnie poziomej	228
7.3.1. Przekształcenie równań zachowania masy i energii	228
7.3.2. Prawo Ficka dla dyspersji płaskiej	230
7.3.2.1. Anizotropia procesu	230
7.3.2.2. Przypadek przepływu jednokierunkowego	230
7.3.2.3. Współczynniki dyspersji	230
7.3.2.4. Przypadek ogólny	231
7.3.3. Robocze postacie równania dyspersji płaskiej	231

7.3.4. Formułowanie i rozwiązywanie zagadnień praktycznych	232
Przykład 7.2	233
7.4. Dyspersja w płaszczyźnie pionowej	234
8. DISPERSJA ZANIECZYSZCZEŃ W OŚRODKACH POROWATYCH	236
8.1. Mechanizm dyspersji hydrodynamicznej	236
8.2. Uśrednianie zmiennych	237
8.3. Dyspersja masy	240
8.3.1. Równania zachowania masy substancji rozpuszczonej dla przypadku filtracji	240
8.3.2. Prawo Ficka dla dyspersji hydrodynamicznej	241
8.3.3. Równanie transportu masy w wodzie podziemnej	243
8.3.4. Efektywny współczynnik dyspersji hydrodynamicznej	243
8.3.5. Formułowanie zagadnień i ich rozwiązywanie	245
Przykład 8.1	245
8.4. Makrodyspersja w gruncie	248
8.4.1. Uwagi ogólne	248
8.4.2. Ilościowy opis procesu makrodyspersji	249
8.5. Dyspersja energii cieplnej w gruncie	250
Przykład 8.2	252
9. MODELE BEZDYFUZYJNE	255
9.1. Uwagi ogólne	255
9.2. Model Streetera-Phelpsa	255
Przykład 9.1	260
9.3. Ogólniejsze modele bezdyfuzyjne	262
10. MODELE UPROSZCZONE	264
10.1. Uwagi wstępne	264
10.2. Układy o parametrach uśrednionych w przestrzeni	264
10.3. Model „martwych stref”	266
10.4. Modele stratyfikowane	267
10.5. Algebraiczne metody opisu migracji zanieczyszczeń	268
10.5.1. Uwagi wstępne	268
10.5.2. Przypadek jednowymiarowy	269
10.5.3. Zbiorniki wodne	270
10.5.4. Atmosfera ziemska	271
Część III. METODA STRUKTURALNA	273
11. CHARAKTERYSTYKA METODY	273
11.1. Podstawowe koncepcje	273
11.2. Fizyczne własności zawiesin	275
11.2.1. Charakterystyka zawiesiny jako całości	275
11.2.2. Charakterystyka cząstek zawiesiny	276
11.2.2.1. Rodzaje zawiesin	276
11.2.2.2. Kształt i struktura cząstek	276
11.2.2.3. Powierzchnia cząstki	277
11.2.2.4. Objętość i porowatość cząstki	277
11.2.2.5. Wilgotność cząstki	277
11.2.2.6. Gęstość cząstki	278
11.2.2.7. Prędkość swobodnego opadania	278
11.2.2.8. Wymiary cząstek	278

12. RÓWNANIA RUCHU CZĄSTKI ZAWIESZONEJ W PŁYNIE	280
12.1. Drugie prawo Newtona	280
12.2. Wyznaczanie sił, działających na cząstkę	281
12.2.1. Siły masowe	281
12.2.2. Siły powierzchniowe	281
12.2.2.1. Uwagi ogólne	281
12.2.2.2. Ustalony ruch kuli w cieczy nielepkiej – paradoks d’Alemberta	282
12.2.2.3. Nieustalony ruch kuli w cieczy nielepkiej – siła od masy stowarzyszonej	284
12.2.2.4. Ustalony ruch kuli w cieczy lepkiej – siła Stokesa	285
12.2.2.5. Nieustalony ruch kuli w cieczy lepkiej – siła Basseta	288
12.2.2.6. Uogólnienia wzoru Stokesa	289
12.2.2.7. Siła Newtona	290
12.3. Podstawowa wersja równania ruchu cząstki	292
13. FORMUŁOWANIE ZAGADNIENÍ	294
13.1. Uwagi ogólne	294
13.2. Warunki początkowe	294
13.3. Warunki brzegowe	295
13.4. Interpretacja geometryczna warunków granicznych	295
14. ROZWIĄZYWANIE ZAGADNIENÍ	297
14.1. Twierdzenia o istnieniu rozwiązań	297
14.2. Rozwiązania analityczne	297
14.3. Pozostałe metody rozwiązywania zadań	301
Przykład 14.1	301
15. PRAKTYCZNA WERSJA METODY STRUKTURALNEJ	303
15.1. Stosowanie pełnej wersji metody	303
15.2. Prędkość swobodnego opadania cząstki	303
15.3. Możliwość uproszczenia metody strukturalnej	305
15.4. Model praktyczny	306
Przykład 15.1	307
16. OPIS RUCHU ZAWIESINY METODĄ FENOMENOLOGICZNĄ	310
Tablice pomocnicze	312
Bibliografia	318
Skorowidz nazwisk	324
Skorowidz rzeczy	326

WYKAZ WAŻNIEJSZYCH OZNACZEŃ

Litery łacińskie

a	– stała pomocnicza
$[A_T]$	– tensor transformacji
b	– szerokość
B	– szerokość
c	– stężenie masowo-objętościowe substancji rozproszonej
c_n	– stężenie nasycenia
c_V	– stężenie objętościowe substancji rozproszonej
C	– stała Stefana-Boltzmana; stała całkowania
C_{CH}	– współczynnik szorstkości według Chézy’ego
C_D	– współczynnik oporu cząstki zawiesiny
Cr_a	– adwekcyjna liczba Couranta
Cr_d	– dyfuzyjna liczba Couranta
C_w	– ciepło właściwe substancji
d_c	– miarodajna średnica cząstki zawiesiny
D	– deficyt gazu, rozpuszczonego w cieczy
$[D]$	– tensor prędkości deformacji
D_G	– skalarny współczynnik dyspersji hydrodynamicznej (w ośrodku porowatym)
$[D_G]$	– tensorowy współczynnik dyspersji hydrodynamicznej
D_{GE}	– skalarny współczynnik efektywnej dyspersji hydrodynamicznej
$[D_{GE}]$	– tensorowy współczynnik efektywnej dyspersji hydrodynamicznej
D_{MG}	– współczynnik makrodyspersji
D_{Mi}	– współczynnik dyfuzji molekularnej i -tej substancji rozpuszczonej
D_{MT}	– współczynnik termodyfuzji
D_n	– współczynnik dyfuzji numerycznej
D_s	– współczynnik transportu symbolicznej wielkości skalarnej s_p
D_T	– skalarny współczynnik dyfuzji burzliwej
$[D_T]$	– tensorowy współczynnik dyfuzji burzliwej
D_{TL}, D_{TH}, D_{TV}	– współczynniki dyfuzji burzliwej dla kierunków głównych (podłużnego, poprzecznego poziomego i poprzecznego pionowego)
D_w	– współczynnik wyrównywania temperatury
e	– gęstość rozkładu energii wewnętrznej
$[E]$	– tensor jednostkowy
E_C	– moduł sprężystości substancji
E_K	– energia kinetyczna
f	– symbol ogólnej zależności funkcyjnej
f_z	– gęstość rozkładu siły masowej
F	– pole powierzchni przekroju poprzecznego strumienia
F_C	– przekrój czynny cząstki zawiesiny

F_M	– siła masowa
F_{MS}	– siła od masy stowarzyszonej
F_P	– siła powierzchniowa
Fr	– liczba Froude’a
g	– przyspieszenie ziemskie ($g = 9,81 \text{ m/s}^2$)
G	– siła ciężkości
h	– średnia głębokość ciekłu lub zbiornika
h_f	– wysokość fali
H	– rzeczywista głębokość ciekłu lub zbiornika
i	– indeks, identyfikujący proces, substancję lub kierunek
\mathbf{i}	– wersor osi $0x$
i_f	– spadek hydrauliczny
i_o	– spadek dna
I_m	– maksymalna wartość indeksu i
j	– indeks, identyfikujący proces, substancję lub kierunek
\mathbf{j}	– wersor osi $0y$
J_m	– maksymalna wartość indeksu j
k	– indeks, identyfikujący proces, substancję lub kierunek
\mathbf{k}	– wersor osi $0z$
k_{dt}	– stała szybkości natleniania wody
k_{ij}	– stała szybkości j -ej reakcji i -tej substancji
k_{mo}	– stała szybkości mineralizacji substancji organicznej
k_N	– stała szybkości nityfikacji
k_T	– kinetyczna energia turbulencji
K	– skalarny współczynnik filtracji
[K]	– tensorowy współczynnik filtracji
K_B	– stała Boltzmanna
[K _D]	– tensorowy współczynnik dyspersji
K_L	– efektywny współczynnik dyspersji podłużnej
K_{ML}	– współczynnik dyspersji podłużnej w ruchu laminarnym
Kn	– liczba Knudsena
K_T	– efektywny współczynnik dyspersji poprzecznej
K_{TL}	– współczynnik dyspersji podłużnej w ruchu turbulentnym
l_K	– skala liniowa Kołmogorowa
l_L	– skala liniowa Lagrange’a
l_m	– droga mieszania według Prandtla
l_o	– średnia droga swobodna molekuly
l_T	– skala liniowa Taylora
L	– odległość, dystans, droga
L_A	– długość podstrefy adwekcyjnej
L_C	– dystans przecięcia brzegu
L_M	– długość pola bliskiego
m_1	– masa jednej cząsteczki

\mathbf{m}_{ai}	– adwekcyjny jednostkowy strumień masy i -tej substancji
\mathbf{m}_{dh}	– jednostkowy strumień masy, powodowany dyspersją hydrodynamiczną
\mathbf{m}_{di}	– dyfuzyjny jednostkowy strumień masy i -tej substancji
\mathbf{m}_D	– jednostkowy dyspersyjny strumień masy
\mathbf{m}_{md}	– jednostkowy makrodyspersyjny strumień masy
\mathbf{m}_M	– gęstość rozkładu wewnętrznych źródeł momentu pędu
\mathbf{m}_T	– jednostkowy turbulentny strumień masy
m_Z	– strumień masy zanieczyszczeń, wprowadzany do odbiornika
M	– masa
M_C	– masa cząstki zawiesiny
\mathbf{n}	– wektor jednostkowy, normalny do powierzchni
n_g	– porowatość substancji
n_M	– współczynnik szorstkości według Manninga
\mathbf{n}_p	– wektor kierunkowy
\mathbf{n}_{pi}	– wersor charakterystycznego kierunku anizotropii
N_A	– liczba Avogadro
N_M	– liczba cząstek w danej objętości
Nu	– liczba Nusselta
OC	– zdolność natleniania wody
p	– ciśnienie
p_{ij} ($i, j = x, y, z$)	– współrzędne tensora naprężenia
\mathbf{p}_n	– naprężenie
p_{wi}	– częstotliwość wiatru, wiejącego z kierunku oznaczonego indeksem i
$[P]$	– tensor naprężenia
Pe	– liczba Pecleta
$[P_i]$	– tensor naprężenia dla i -tego składnika mieszaniny
Pr	– liczba Prandtla
\mathbf{q}_d	– jednostkowy dyfuzyjny strumień energii
\mathbf{q}_D	– jednostkowy dyspersyjny strumień energii
q_e	– intensywność wewnętrznych źródeł energii
q_{es}	– efektywna intensywność wewnętrznych źródeł energii
q_M	– strumień przejmowanej masy
Q	– wydatek płynu (Q_w – wody, Q_s – ścieków, Q_p – powietrza)
Q_C	– strumień cyrkulacji poprzecznej
r	– promień; efektywność reakcji
\mathbf{r}	– promień wodzący
\mathbf{r}_c	– wektor wodzący trajektorii cząstki zawiesiny
R	– promień (koła, kuli itp.)
Re	– liczba Reynoldsa
R_G	– stała gazowa
R_H	– promień hydrauliczny
Ri	– liczba Richardsons
R_L	– funkcja autokorelacyjna Lagrange'a
s_p	– gęstość rozkładu symbolicznej wielkości skalarnej

S	– pole powierzchni
S_s	– współczynnik pojemności sprężystej
Sc	– liczba Schmidta
Sh	– liczba Strouhala
S_{WM}	– zasolenie wody
t	– czas
t_{rm}	– miarodajny czas reakcji
t_s	– czas działania siły
t_u	– czas uśredniania w teorii turbulencji
t_{ze}	– efektywny czas zatrzymania płynu
T	– temperatura
T_f	– okres fali
T_K	– współczynnik krętości ośrodka porowatego
T_L	– skala czasowa Lagrange'a
\mathbf{u}	– prędkość adwekcji
\mathbf{u}^*	– prędkość względna składnika względem mieszaniny lub roztworu
\mathbf{u}_b	– prędkość barycentryczna
\mathbf{u}_f	– prędkość filtracji
u_i	– i -ta składowa wektora \mathbf{u}
u_m	– prędkość maksymalna
u_n	– normalna składowa wektora prędkości
\mathbf{u}_p	– prędkość porowa
U	– moduł prędkości uśrednionej względem zmiennych przestrzennych
\mathbf{U}	– wektor prędkości uśrednionej względem zmiennych przestrzennych
U^*	– prędkość dynamiczna
\mathbf{U}_c	– wektor prędkości cząstki zawiesiny
U_{ck}	– końcowa prędkość cząstki zawiesiny
U_{cs}	– prędkość swobodnego opadania cząstki
U_{nr}	– prędkość nierozmywająca
U_{nz}	– prędkość niezamulająca
U_{ss}	– prędkość skrzepowanego opadania
V	– objętość
V_C	– kinetyczna objętość cząstki zawiesiny
\mathbf{w}	– prędkość wiatru
W	– ogólny symbol wielkości fizycznej
\mathbf{W}_N	– siła oporu cząstki według Newtona
\mathbf{W}_P	– siła wyporu
\mathbf{W}_S	– siła oporu cząstki według Stokesa
x	– współrzędna przestrzenna
y	– współrzędna przestrzenna
y_L, y_P	– funkcje, opisujące kształt lewej i prawej linii brzegowej ciekłu
z	– współrzędna przestrzenna
z_d	– rzędna dna ciekłu lub zbiornika
z_{ft}	– intensywność produkcji tlenu w trakcie fotosyntezy

z_g	– rzędna swobodnej powierzchni wody w cieku lub zbiorniku
z_{ij}	– funkcja źródłowa j -ej reakcji i -tej substancji
Z_i	– sumaryczna funkcja źródłowa i -tej substancji
Z_s	– funkcja źródłowa dla symbolicznej wielkości skalarnej

Litery greckie

α_M	– współczynnik przejmowania masy
α_S	– współczynnik masy stowarzyszonej
α_T	– współczynnik przejmowania ciepła
β	– współczynnik rozszerzalności cieplnej
Γ	– brzeg obszaru
δ	– funkcja delta Diraca
ε	– intensywność dyssypacji energii ruchu turbulentnego
κ	– stała von Karmana ($\kappa=0,4$ lub $\chi=0,417$)
λ	– współczynnik molekularnego przewodzenia ciepła; współczynnik strat energii w rurociągu według Nikuradsego
λ_T	– skalarny współczynnik turbulentnego przewodzenia ciepła
$[\lambda_T]$	– tensorowy współczynnik turbulentnego przewodzenia ciepła
μ	– dynamiczny współczynnik lepkości molekularnej
μ_T	– skalarny dynamiczny współczynnik lepkości burzliwej
$[\mu_T]$	– tensorowy dynamiczny współczynnik lepkości burzliwej
ν	– kinematyczny współczynnik lepkości molekularnej
ν_T	– skalarny kinematyczny współczynnik lepkości burzliwej
π	– stała matematyczna ($\pi=3,14\dots$)
Π	– iloraz bezwymiarowy
$[\Pi]$	– tensor naprężeń burzliwych (tensor Reynoldsa)
Π_m	– potencjał sił masowych
ρ	– gęstość płynu
ρ_c	– gęstość cząstki zawiesiny
σ	– wariancja funkcji
τ_o	– czas życia osiadłego molekuly
τ_s	– naprężenie styczne na ścianie
φ	– potencjał filtracji
φ_G	– szerokość geograficzna
Φ	– potencjał prędkości płynu
Ψ	– funkcja prądu
ω_z	– prędkość kątowna obrotu Ziemi
Ω	– parametr Coriolisa

Symbole

- – wielkość uśredniona lokalnie w czasie
- ~ ~ – wielkość uśredniona względem jednej lub dwóch zmiennych przestrzennych
- ≡≡ – wielkość uśredniona w przestrzeni porowej ośrodka porowatego
- ^^^ – wielkość uśredniona w przestrzeni porowej i powtórnie uśredniona względem jednej lub dwóch zmiennych przestrzennych
- ' – burzliwa fluktuacja wielkości fizycznej
- + – odchyłka wielkości fizycznej między jej wartością rzeczywistą a wartością uśrednioną względem zmiennych przestrzennych
- x – odchyłka wielkości fizycznej między jej wartością rzeczywistą a wartością uśrednioną w przestrzeni porowej
- ° – odchyłka wielkości fizycznej między jej wartością uśrednioną w przestrzeni porowej a wartością powtórnie uśrednioną względem zmiennych przestrzennych

Część I

UKŁADY NIEJEDNORODNE

1. MIGRACJA ZANIECZYSZCZEŃ JAKO ZAGADNIENIE MECHANIKI PŁYNÓW NIEJEDNORODNYCH

Mianem płynu niejednorodnego określać będziemy substancję płynną, zawierającą więcej niż jeden związek chemiczny. Istnieją dwie główne kategorie takich płynów – *roztwory* (gdy wszystkie składniki układu są rozdrobnione do poziomu molekularnego) oraz *zawiesiny* (gdy przynajmniej jeden składnik występuje w postaci ziaren, kropeł, pęcherzyków i tym podobnych małych cząstek, niebędących molekułami, rozprowadzonych w całej masie płynu nośnego, choć niekoniecznie z jednakowym stężeniem).

Potrzeba uwzględniania wpływu substancji rozproszonych (rozpuszczonych oraz/lub zawieszonych) w płynie nośnym na zachowanie całego układu pojawiła się bardzo dawno. Właściwie towarzyszy ona człowiekowi od początków jego świadomej aktywności na polu nauk przyrodniczych i technicznych, narastając w miarę postępu praktycznych zastosowań rezultatów badań naukowych.

Ważnym ograniczeniem był tu jednak fakt, iż obecność substancji rozproszonych bardzo komplikuje ilościowy opis procesów, w których biorą udział płyny niejednorodne. Trudności pojawiały się już na etapie matematycznego opisu tych procesów za pomocą równań fizyki matematycznej, a stawały się wręcz niemożliwe do przewyciężenia, gdy należało konkretne równania rozwiązać. Trudności formalne stały się istotnym bodźcem dla rozwoju matematycznych metod przybliżonego rozwiązywania równań, a w szczególności – metod numerycznych. Niestety, pracochłonność tego typu podejścia przez długi czas bardzo ograniczała możliwość ich praktycznego zastosowania. Dopiero pojawienie się i upowszechnienie maszyn liczących spowodowało zasadniczy przełom w tym zakresie.

Trzeba wszakże pamiętać, że w przed upowszechnieniem komputerów ukształtowały się jednak zasadnicze zręby teorii i praktyki opisu, nie tylko zachowania się układów niejednofazowych, ale także niemal wszystkich zjawisk i procesów przyrodniczych i technicznych. W dalszym ciągu rozważać będziemy szczególny aspekt zachowania się roztworów i zawiesin, a mianowicie ich ruch. Tak więc interesować nas będzie *mechanika płynów niejednorodnych*.

Analizując rozwój tej tematyki w przeszłości, można zauważyć, że ze względu na jednorodność chemiczną układu dzielono wszelkie problemy na dwie kategorie – takie, przy opisie których nie można było pominąć obecności substancji rozproszonych, oraz

takie, których przebieg z akceptowaną dokładnością dawał się opisać bez uwzględnienia tego czynnika, lub co najwyżej po jego uproszczonym uwzględnieniu.

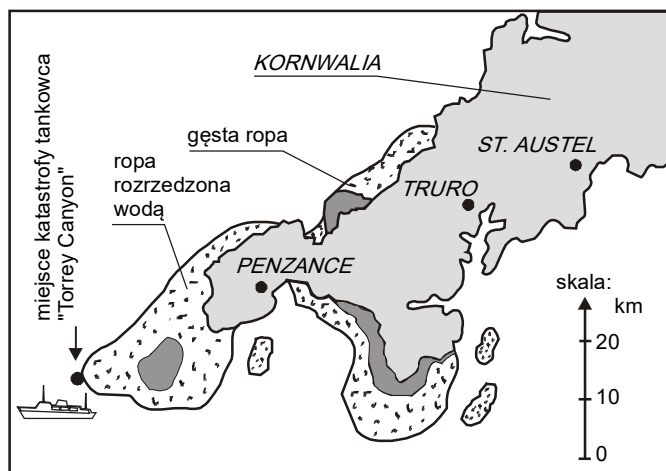
Pierwsza z tych kategorii dotyczyła głównie szeroko pojętych zagadnień produkcyjnych. Większość gałęzi przemysłu, energetyka i ciepłownictwo, transport hydrauliczny i pneumatyczny, a nawet medycyna – nie mogły obyć się bez stosowania choćby uproszczonych metod ilościowego opisu procesów przenoszenia masy (jak też pokrewnych im procesów przenoszenia energii). Dla zaspokojenia tych potrzeb powstały bardzo rozwinięte działy odpowiednich dyscyplin nauki i techniki. Ich istotną cechą jest daleko posunięta specjalizacja. Powstające metody obliczeniowe były bardzo silnie związane z potrzebami danej branży, a tym samym trudne do wykorzystania w dziedzinach odrębnych. Drugą cechą tych metod jest ich bardzo silny związek z wynikami pomiarów i obserwacji oraz z technicznymi charakterystykami konkretnych obiektów. Bardzo powszechne są tu wzory empiryczne, których struktura często nie wykazuje żadnych związków z teoretycznym opisem zjawiska. Tak ukształtowane narzędzie (a raczej zespół narzędzi, odrębnych dla poszczególnych działów techniki) wchodzi w skład specjalistycznej wiedzy inżynierskiej i jest do dziś z powodzeniem stosowane w praktyce.

Druga z wymienionych wyżej kategorii dotyczyła tych dziedzin, w których istniała potrzeba badania ruchu dużych mas płynów, które w zasadzie miały charakter jednorodny, a jeśli zawierały pewne ilości substancji rozproszonych, to ich obecność nie była celowa, a raczej miała charakter *domieszki*. Ten typ zadań dominował przy opisie zjawisk spotykanych w naturze oraz w tych dyscyplinach techniki, które miały ścisły związek z przyrodą. Można tu wymienić hydrotechnikę, hydrologię, oceanologię, budownictwo morskie, meteorologię, klimatologię, geologię, hydrogeologię i inne dyscypliny, obecnie często obejmowane pojemnymi pojęciami inżynierii środowiska i ochrony środowiska.

Większość zjawisk, objętych przez te dziedziny, dotyczyła w pierwszej kolejności domieszek masy, mających źródła naturalne (deszcz, mgła, śnieg, grad, burze piaskowe, przemieszczanie się pyłu wulkanicznego, ruch osadów dennych w ciekach i zbiornikach wodnych, przenoszenie pyłków kwitnących roślin przez wiatr, zmiany zasolenia mórz i oceanów). Początkowo opis tych zjawisk miał charakter jakościowy. Sam ruch nośnika wyznaczano najczęściej tak, jak gdyby był to płyn jednorodny, ewentualnie uwzględniając obecność substancji rozproszonych w sposób uproszczony, korygując stałe materiałowe płynu nośnego (jego gęstość, współczynnik lepkości i inne). Gdy wpływu substancji rozproszonych nie dawało się pominąć, także tutaj opracowywano relacje o walorach technicznych, które zresztą wciąż są wykorzystywane w projektowaniu obiektów (na przykład przy pracach nad ochroną brzegów morskich, czy przy regulacji rzek).

Pojawienie się i upowszechnienie maszyn liczących oraz rozwój metod przybliżonego rozwiązywania równań miały przełomowe znaczenie także w tej kategorii zagadnień. Ale chyba równie ważne było pod względem funkcjonalnym zwrócenie uwagi na problem *skazania naturalnego środowiska człowieka*. Obok wspomnianego już terminu „*domieszka*” pojawiło się pojęcie *zanieczyszczenia*, określające te substancje rozproszone w płynach, które znalazły się tam jako odpady lub produkty uboczne aktywności ludzkiej, a które wykazują szkodliwe oddziaływanie zarówno na organizmy ludzkie, jak też na przyrodężywioną i nieożywioną. Warto jednak podkreślić, że zasadniczą przyczyną tego przebudzenia wielu społeczeństw wydaje się niestety nie ludzka przezorność, lecz fakt wielokrotnego, wręcz katastrofalnego, przekroczenia wszelkich dopuszczalnych poziomów stężenia zanieczyszczeń.

Ogromne znaczenie dla podjęcia refleksji i starań nad środkami zaradczymi miały spektakularne katastrofy ekologiczne. Pokazały one dobitnie, że skażenie środowiska ma charakter globalny, a walka z nim wymaga z jednej strony ścisłej współpracy międzynarodowej, zaś z drugiej – stosowania dokładnych metod prognozowania przebiegu zjawiska. Nawet bowiem już po wystąpieniu katastrofy ekologicznej nie można ograniczyć się do samej akcji ratunkowej, gdyż zabezpieczenie wszystkich możliwości kierunków migracji zanieczyszczeń byłoby równoznaczne z marnotrawstwem środków. Obrazują to schematy na rys. 1.1 (pokazującym położenie obszarów zanieczyszczonych ropą, pochodzącą z tankowca *Torrey Canyon*, który w marcu 1967 roku zatonął u wybrzeży Kornwalii) oraz na rys. 1.2 (gdzie uwidocznił rejon skażony w wyniku katastrofy elektrowni atomowej w Czernobylu). Widać na nich, że proces migracji odbywa się w pewnych kierunkach. Ich określenie na etapie prognozy znakomicie ułatwia akcję ratunkową.



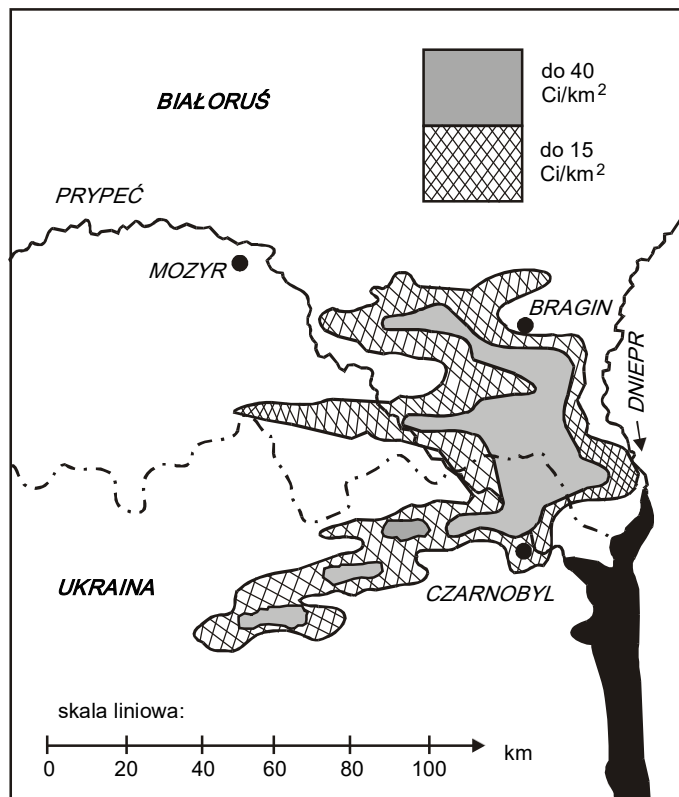
Rys. 1.1. Skutki katastrofy tankowca *Torrey Canyon* (stan na koniec marca 1967 roku) [3]

Z upływem czasu sytuacja stała się alarmowa, a konieczność redukcji zagrożeń i poprawy sytuacji – nakazem chwili. Można w tym zakresie mówić o dwóch typach zadań – o usuwaniu zanieczyszczeń tam, gdzie się one pojawiły (najlepiej jeszcze przed ich emisją do środowiska naturalnego), oraz o przewidywaniu zachowania się tych substancji, które już się w tym środowisku znalazły. W ten sposób pojawia się potrzeba opisu *procesów migracji zanieczyszczeń* (lub zamiennie – ich *rozprzestrzeniania* albo *transportu*).

To niemal jednoczesne pojawienie się dwóch bardzo ważnych czynników (ogromnego wzrostu możliwości obliczeniowych oraz niezwykle pilnej konieczności podjęcia działań nad poprawą stanu środowiska naturalnego) zaowocowało w ciągu ostatnich trzech dziesiątków lat bardzo gwałtownym ożywieniem i wzrostem aktywności w dziedzinie matematycznego modelowania zagadnień, związanych z migracją zanieczyszczeń.

Dodatkowym czynnikiem są tu regulacje prawne zawierające konkretne wymogi odnośnie do dokumentacji technicznej, przygotowywanej dla obiektów, które wpływają (lub nawet tylko mogą wpływać) na stan zanieczyszczenia środowiska. W szczególności chodzi tu o te ustawy i zarządzenia, które nakazują przeprowadzanie procedur *oceny oddziaływania na środowisko* (OOS) planowanych lub projektowanych inwestycji. Kon-

krétne regulacje prawne ulegają co pewien czas zmianom i korektom, toteż każdorazowo należy zapoznać się z aktualnym stanem rzeczy (obecnie obowiązują dwa typy opracowań; są to *Prognoza oddziaływania na środowisko* oraz *Raport oddziaływania przedsięwzięcia na środowisko*).



Rys. 1.2. Skażenie cezem 137 w rejonie Czarnobyla (stan na 27.04.1986) [3]

Jednakże tak gwałtowne zapotrzebowanie praktyki na rozwiązywanie konkretnych zagadnień miało swój wpływ na usytuowanie środka ciężkości podejmowanej tematyki badawczej, zarówno w zakresie prac teoretycznych i podstawowych, jak też w tematyce aplikacji technicznych. Znalazło to swój wyraz także w literaturze, poświęconej przedmiotowemu zagadnieniu. Nawet stosunkowo niedawno wydawane tytuły wykazują pewną jednostronność – albo poświęcone są prezentacji materiału o charakterze podstawowym (np. [146]), albo ich treść nakierowana jest na wybrane grupy problemów praktycznych (np. [51, 110]). I właśnie tę nierównomierność ma uzupełnić niniejsza praca.

Jest ona z założenia monograficznym opracowaniem poświęconym problemowi migracji zanieczyszczeń. Podjęto w nim kolejne bloki zagadnień, poczynając od teoretycznych koncepcji, stojących u podstaw istniejących modeli procesów przenoszenia masy i energii, poprzez poszczególne klasy tych modeli, aż po konkretne rozwiązania praktyczne. W szczególności dużo uwagi poświęcono wybranym zagadnieniom, które często decydują o stopniu dokładności opisu rozważanego zjawiska równaniami fizyki matematycznej, a które

nie były dotychczas z odpowiednią wnikliwością podejmowane przez innych autorów. Chodzi tu o takie problemy, jak wpływ elektrostrykcji i kontrakcji oraz sposób ich uwzględniania w równaniu stanu płynu niejednorodnego, analiza stosowanych procedur uśredniania zmiennych oraz ich wpływ na poszczególne człony równań, czy wreszcie kwestia izotropii i anizotropii procesu migracji. Dużo uwagi poświęcono uporządkowaniu metod wyznaczania współczynników transportu.

Dodatkowo zdecydowano się także na włączenie do opracowania pewnych klasycznych partii materiału. Uznano bowiem, że w ten sposób, kosztem umiarkowanego rozszerzenia objętości tekstu, uzyska się pracę o dużo większym zasięgu odbiorców, niż gdyby zawierał on tylko wyspecjalizowane działy przedmiotowej tematyki.

Drugim uzasadnieniem tej decyzji jest odczucie, iż w chwili obecnej stan wiedzy i możliwości techniczne dają szansę na rozwiązywanie znacznie szerszych zagadnień, niż podejmowane dotychczas. W szczególności środowisko techniczne jako narzędzie swej pracy powszechnie już zaakceptowało komercyjne oprogramowanie komputerowe. Aby jednak mogły powstawać doskonalsze wersje takich programów, celowe jest poszerzenie podstaw teoretycznych tej dziedziny wiedzy. Pod tym też kątem powstawała poniższa praca.

Jest więc ona adresowana do trzech kategorii odbiorców:

- 1) do pracowników naukowych zajmujących się zagadnieniami przenoszenia masy i energii (w swym pełnym zakresie);
- 2) do osób zainteresowanych tworzeniem i propagowaniem nowych metod obliczeniowych w dziedzinie migracji zanieczyszczeń (dla których szczególną uwagę zwrócono na zasady i możliwości budowy modeli matematycznych);
- 3) do pracowników naukowych, doktorantów, studentów i inżynierów stosujących gotowe oprogramowanie maszyn liczących.

2. CHARAKTERYSTYKA PŁYNÓW NIEJEDNORODNYCH

2.1. Molekularna budowa materii

2.1.1. Uwagi ogólne

Do podstawowych cech materii należy nieciągłość jej wewnętrznej struktury. Najmniejszą ilość substancji prostej lub związku, zdolną do samodzielnego istnienia i zachowującą wszystkie własności chemiczne tej substancji, nazywamy *cząsteczką* (*molekulą*, *drobiną*). Gdy rozważana substancja jest pierwiastkiem, to jej najmniejszą ilość, zachowującą własność substancji, nazywamy *atomem*. Jednakże atomy większości pierwiastków nie wykazują zdolności do samodzielnego istnienia. Jedynie atomy gazów szlachetnych, ze względu na swą symetryczną budowę elektronową, są trwałe. Atomy pozostałych pierwiastków uzyskują stabilność dopiero po zrównoważeniu wewnętrznych pól elektrycznych. Jest to możliwe albo poprzez oddzielenie elektronów niesymetrycznych, albo poprzez przyłączenie elektronów brakujących do uzyskania symetrii, albo przez utworzenie układu złożonego z dwóch lub więcej atomów. Ta ostatnia możliwość oznacza powstanie zdefiniowanej już cząsteczki, także w przypadku pierwiastków (przykładowo, w zwykłych warunkach tlen występuje w postaci dwuatomowych cząsteczek o symbolu O_2).

Każde ciało, napotykanie w przyrodzie lub technice, jest w istocie rzeczą *makroskopowym zbiorem molekuł*. Rozmiary takich ciał w porównaniu z rozmiarami molekuł są wręcz ogromne (średnica atomu jest rzędu 10^{-10} m – patrz tabela 1), zaś liczba molekuł tworzących dane ciało jest niesłychanie wielka; ich liczba w jednym molu substancji jest równa liczbie Avogadra $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$).

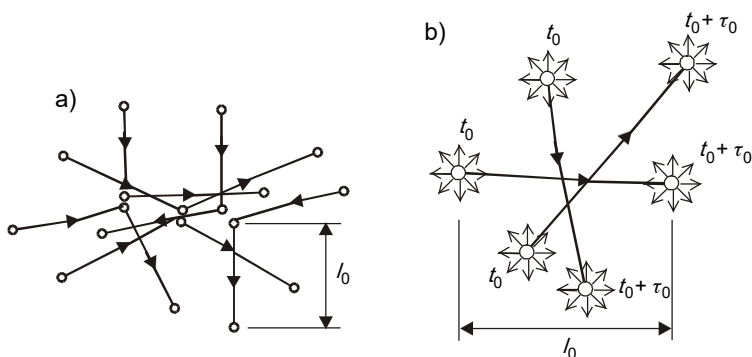
Powyższe stwierdzenia mają ogromne znaczenie praktyczne. Z jednej strony każą pamiętać o tym, że stan i zachowanie się każdego ciała (czyli makroskopowego zbioru drobin) jest wypadkową stanu i zachowania się tworzących je molekuł, ale z drugiej strony – prowadzą do wniosku, że wypadkowa ta ma charakter statystyczny, wobec czego musi być opisywana w kategoriach wielkości średnich.

2.1.2. Skala elementarna i skala makroskopowa

W dalszym ciągu najczęściej posługiwać się będziemy *teorią kontynuinalną*, zgodnie z którą każdą substancję traktuje się tak, jak gdyby tworząca ją materia wypełniała zajmowaną część przestrzeni w sposób *ciągły* (choć intensywność „upakowania” materii w obrębie

ciała może zmieniać się względem przestrzeni i czasu). Stan i własności ośrodka ciągłego (w ramach modelu kontynualnego) opisujemy poprzez *makroskopowe wielkości fizyczne*. Są one definiowane (patrz podrozdz. 2.2) w *skali makroskopowej*, czyli w skali odpowiadającej wymiarom ciała, a więc bez konieczności odwoływania się do pojęcia molekuly. Pozwala to na uniknięcie trudności, związanych ze wspomnianym już statystycznym uśrednianiem *mikroskopowych wielkości fizycznych* (opisujących stany molekuł) podczas przechodzenia od *skali elementarnej* (z poziomu molekularnego) do skali właściwej dla ośrodka ciągłego. Nie oznacza to jednak, że można całkowicie zrezygnować ze zrozumienia relacji między wielkościami mikroskopowymi a makroskopowymi. Problemowi temu poświęcimy stosowną uwagę w trakcie dalszych rozważań. Teraz nasuwa się pytanie, czy każde ciało zawsze można traktować jako utworzone z substancji ciągłej?

Aby na nie odpowiedzieć, przyjmijmy klasyczny model molekularnej struktury układu makroskopowego (rys. 2.1). Zgodnie z tym modelem poszczególne molekuly traktujemy jako punkty materialne. Każda z tych molekuł porusza się z pewną indywidualną prędkością \mathbf{u}_p . Może być tak, że lokalne zespoły molekuł przemieszczają się względem innych takich zespołów. Taki makroskopowy ruch z prędkością \mathbf{u} uwarunkowany jest wartościami sił, działających na ciało. W szczególności jednak prędkość makroskopowa może być równa zero, podczas gdy nawet wtedy nie ustaje chaotyczny ruch mikroskopowy (którego trajektorie zobrazowano na rys. 2.1 strzałkami).



Rys. 2.1. Modele molekularnej struktury płynu (a) gaz, b) ciecz)

Szczegółowa charakterystyka ruchu chaotycznego zależy od stanu skupienia materii. Co więcej, w mechanice jest ona wręcz podstawą do rozróżniania poszczególnych stanów skupienia – *gazowego*, *ciekłego* i *stałego* (w ramach którego wyróżniamy stany *szklisty* i *kryształiczny*).

2.1.3. Molekularny model gazu

Stosunkowo najprostszy jest opis zachowania się molekuł *gazu*. Znajdują się one w nieustannym ruchu, którego kierunek ulega zmianie w wyniku zderzeń pomiędzy poszczególnymi drobinami tego gazu, lub pomiędzy drobinami gazu a drobinami substancji graniczących z gazem (ściankami naczynia, powierzchniami ciała). Tym samym dystans, przebywany przez każdą molekulę między kolejnymi zderzeniami, uzależniony jest od stopnia zagęszczenia molekuł. Dystans ten jest zróżnicowany i ściśle zależy od temperatury i ci-

śnienia gazu. W praktyce posługujemy się jego wartością średnią, czyli *średnią drogą swobodną* molekuł (l_0). Jest ona wielkością rzędu 10^{-7} m (patrz tabela 1).

Zróźnicowane są również prędkości chaotycznego ruchu molekuł \mathbf{u}_p . Zmienność ich modułów (w teoretycznie maksymalnym zakresie od zera do nieskończoności) opisana jest przez *funkcję rozkładu* $f_R(x, y, z, u_{px}, u_{py}, u_{pz}, t)$. Jest ona definiowana jako takie wyrażenie matematyczne, które określa liczbę molekuł dN_M w elementarnej objętości $dV = dx dy dz$, określającej otoczenie dowolnego punktu $P(x, y, z)$, w chwili czasu t , których prędkość leży w granicach od \mathbf{u}_p do $(\mathbf{u}_p + d\mathbf{u}_p)$, zgodnie z relacją

$$dN_M = f_R(x, y, z, u_{px}, u_{py}, u_{pz}, t) dx dy dz du_{px} du_{py} du_{pz}. \quad (2.1)$$

W ogólnym przypadku postać tej funkcji nie jest znana, ale dla gazów doskonałych, znajdujących się w stanie równowagi, mamy klasyczny *rozkład Maxwella–Boltzmann* [34]

$$f_R(x, y, z, u_{px}, u_{py}, u_{pz}, t) = C_{MB} \exp(-E_c/K_B T). \quad (2.2)$$

gdzie: T – temperatura bezwzględna.

Symbol C_{MB} oznacza stały czynnik normalizacyjny, wyznaczany tak, aby spełniony był warunek

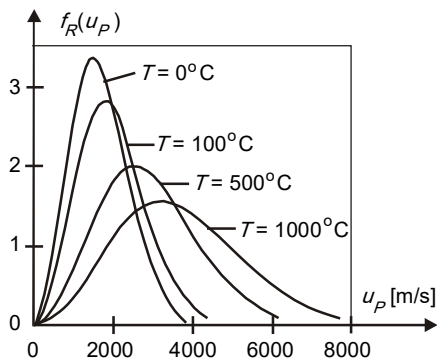
$$N_M = \iiint_{-\infty}^{+\infty} \iiint_{-\infty}^{+\infty} f_R dx dy dz du_{px} du_{py} du_{pz}, \quad (2.3)$$

gdzie N_M jest całkowitą liczbą molekuł w rozważanym układzie. Z kolei E_c oznacza całkowitą energię cząsteczki

$$E_c = \frac{1}{2} m_1 u_p^2 + \Pi_m, \quad (2.4)$$

gdzie m_1 – masa pojedynczej molekuły, Π_m – potencjał sił masowych, zaś K_B jest stałą Boltzmann

$$K_B = 1,3806 \cdot 10^{-23} \text{ (J/K)}. \quad (2.5)$$



Rys. 2.2. Rozkłady prędkości cząsteczek wodoru według Maxwella-Boltzmann

Przykładowe rozkłady prędkości cząsteczek według (2.2) dla wodoru pokazano na rys. 2.2.

Wiele zagadnień można rozwiązać z dostateczną dokładnością, jeżeli rzeczywiste prędkości chaotycznego ruchu drobin zastąpimy ich wartością średnią. Dla rozkładu Maxwella-Boltzmann mamy

$$\bar{u}_p = \sqrt{8 K_B T / \pi m_1}. \quad (2.6)$$

Tak obliczona prędkość średnia jest nieco mniejsza niż *średnia prędkość kwadratowa*

$$\sqrt{u_p^2} = \sqrt{3 K_B T / m_1}. \quad (2.7)$$

Ostatnia relacja wynika ze znanej zależności kinetycznej teorii gazów, wiążącej kinetyczną energię cząsteczek z temperaturą bezwzględną [34]

$$\frac{1}{2} m_1 u_p^2 = \frac{3}{2} K_B T. \quad (2.8)$$

Przykładowe wartości średniej prędkości cząsteczek podano w tabeli 1. Są one znaczne (rzędu prędkości wylotowej pocisku karabinowego), czego konsekwencją jest znaczna prędkość fal dźwiękowych w powietrzu (przekazywanych przez ruch molekuł), wynosząca około 330 m/s.

2.1.4. Molekularny model cieczy

Opis molekularnych procesów zachodzących w cieczach nie jest tak prosty, jak w przypadku gazów. Jednakże mechanizm interesujących nas zjawisk przenoszenia masy i energii możemy z wystarczającą dokładnością opisać, jeżeli rozłożymy chaotyczny ruch molekuł cieczy na dwie składowe:

- ruch drgający wokół położenia chwilowej równowagi,
- przeskok od poprzedniego do następnego położenia chwilowej równowagi.

Obie składowe schematycznie przedstawiono na rys. 2.1b. Molekuła przez pewien czas τ_0 (zwany *czasem życia osiadłego*) przebywa w otoczeniu pewnego punktu, wykonując nieregularne drgania, po czym „przeskakuje” do następnego położenia. Dystans między nimi, zwany *drogą przeskoku*, jest w dużym stopniu wielkością analogiczną do średniej drogi swobodnej molekuł gazu, toteż również oznaczmy go przez l_0 . Jest to wielkość rzędu przeciętnej średnicy molekuły, czyli 10^{-10} m.

Czasy życia osiadłego molekuł różnych cieczy są bardzo zróżnicowane. W przypadku wody mamy 10^{-11} sekundy, podczas gdy dla wosków, asfaltów, kitów i tym podobnych substancji czas ten mieści się w granicach od 10^{-4} do 10^4 sekundy. Zauważmy, że dla gazów z definicji mamy $\tau_0 = 0$.

2.1.5. Molekularny model ciała stałego

Zachowanie się drobin ciała stałego o tyle różni się od zachowania molekuł cieczy, że siły ich wzajemnego oddziaływania bardzo utrudniają ruch poszczególnych cząsteczek. W efekcie drgają one przeważnie wokół tego samego położenia równowagi. Innymi słowy – czas życia osiadłego dla drobin ciała stałego jest bardzo długi (teoretycznie dąży do nieskończoności, a w praktyce jego wartość przekracza 10^4 s), zaś ruchy przeskoku wykonywane są bardzo rzadko (jak widać, nie częściej niż raz na trzy godziny).

2.1.6. Pojęcie płynności

W świetle powyższego nasuwa się pytanie, czym w istocie rzeczy różnią się od siebie ciecze i ciała stałe. Okazuje się [101], że dla uwidocznienia tej różnicy z punktu widzenia mechaniki musimy rozważyć reakcję ciała na działanie siły, uwzględniając czas jej działania t_s . Jeżeli czas ten jest krótszy od czasu życia osiadłego ($t_s < \tau_0$), to odkształcenie ciała wymaga pokonania przez działającą siłę więzów międzymolekularnych (które stawiają znaczny opór). Mówimy wtedy, że *substancja zachowuje się jak ciało stałe*. W przeciwnym razie (gdy $t_s > \tau_0$) odkształcenie jest „wspomagane” przez chaotyczny ruch molekuł, dzięki czemu może osiągać dowolnie duże wartości (o ile siła działa dostatecznie długo). *Tak reagujące substancje nazywamy płynami (cieczami i gazami)*.

Zauważmy, że w przypadku gazów ($\tau_0 = 0$) cecha płynności nie budzi zastrzeżeń. Natomiast (z punktu widzenia mechaniki) nie można ustalić zdecydowanej granicy pomiędzy cieciami a ciałami stałymi, gdyż jest ona uzależniona od czasu oddziaływania siły na układ. Na szczęście w interesujących nas tu zagadnieniach migracji zanieczyszczeń występują woda i powietrze – substancje, które w technicznie ważnych warunkach dynamicznych można bez wątpienia traktować jako płynne.

2.1.7. Model ośrodka ciągłego

W punkcie 2.1.2. postawiliśmy pytanie o dopuszczalność stosowania do ciał rzeczywistych teorii kontynualnej. W świetle dotychczasowych rozważań możemy tu jako kryterium ilościowe przyjąć stosunek średniej drogi swobodnej (dla gazów) lub średniej drogi przeskoku (dla cieczy) do charakterystycznego wymiaru liniowego rozważanego układu L (może to być średnica rury, głębokość rzeki, średnica balonu, długość pocisku itd.), który nazywany jest *liczbą Knudsen* Kn . W mechanice przyjmuje się, że jeżeli

$$Kn = l_0/L < 0,01, \quad (2.9)$$

to substancję wypełniającą układ możemy traktować jako ośrodek ciągły. Warunek ten w problemach technicznych z reguły jest spełniony. Problemy z ciągłością ośrodka pojawiają się w zagadnieniach specjalnych, na przykład w rurociągach próżniowych, czy przy badaniu ruchu samolotów w bardzo wysokich warstwach atmosfery.

2.1.8. Układy proste i układy złożone

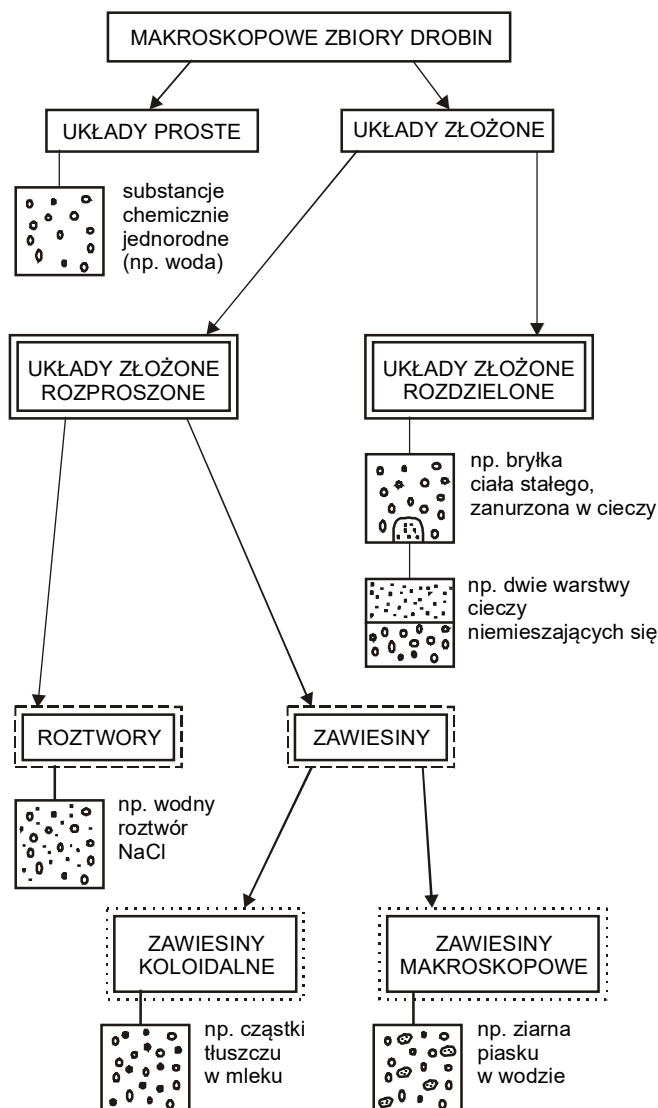
Dotychczas analizowaliśmy makroskopowe zbiory drobin, czyli ciała, nie zastanawiając się nad ewentualnymi różnicami w chemicznej budowie tych drobin. Tymczasem różnice te będą odgrywały zasadniczą rolę w naszych dalszych rozważaniach. Aby je opisać, wprowadźmy pojęcie *układu prostego* oraz *układu złożonego*. Zdefiniujemy je, posługując się zrozumiałymi terminami *jednorodności chemicznej* (co oznacza taką sytuację, gdy wszystkie molekuly ciała mają jednakową budowę chemiczną) oraz *jednorodności fizycznej* (gdy całe ciało wykazuje jednakowe własności fizyczne). Zasadnicze znaczenie będą dla nas miały własności fizyczne wynikające ze stanu skupienia, czyli *fazy*. Układy jednorodne fizycznie nazwiemy *jednofazowymi*, zaś fizycznie niejednorodne – *wielofazowymi*. Termin *jednorodność* zarezerwujemy dla substancji o tej samej budowie chemicznej. Gdy układ będzie utworzony przez różne związki chemiczne, nazwiemy go *niejednorodnym*.

Po tym ustaleniu pojęć możemy powiedzieć, że *układem prostym* jest *jednorodny i jednofazowy makroskopowy zbiór drobin*. Makroskopowe zbiory drobin niejednorodne oraz/albo wielofazowe są *układami złożonymi*.

Z kolei układ złożony, składający się z dwóch lub więcej faz, z których każda wypełnia jednolicie pewną jego część i żadna nie przenika całego układu, nazwiemy *układem rozdzielonym* [44]. Gdy natomiast jedną z faz układu możemy traktować jako ośrodek rozpraszający, a pozostałe – jako substancje (mniej lub bardziej równomiernie) przenikające ten ośrodek, to mówimy o *układzie rozproszonym (zdyspergowanym)* lub o *mieszaniu*.

W praktyce omawiane tu układy niejednorodne noszą nazwy skrócone. I tak *układy złożone jednofazowe* nazywamy *roztworami* (lub *mieszaninami molekularnymi*), zaś *układy złożone wielofazowe* – *zawiesinami*.

Zachowanie się zawiesin w zasadniczym stopniu zależy od stopnia rozdrobnienia tworzących je cząstek. Granicę o charakterze jakościowym obserwujemy dla przeciętnej średnicy cząstek $d_c = d_{cg} = 10^{-6}$ m. Gdy średni wymiar cząstek jest większy od granicznego ($d_c > d_{cg}$), dany układ wielofazowy nazywamy *zawiesiną makroskopową* (lub *mieszaniną makroskopową*, albo *układem o rozproszeniu makroskopowym*). W przeciwnym razie (gdy $d_c < d_{cg}$) mówimy o *zawieszinie koloidalnej* (*mieszanie koloidalnej* lub o *układzie o rozproszeniu koloidalnym*).



Rys. 2.3. Klasyfikacja makroskopowych zbiorów molekuł

Przedstawiony wcześniej podział układów (w zwartej formie pokazany na rys. 2.3) nie ma charakteru formalnego, lecz jest uzasadniony zróżnicowaniem ich własności fizycznych

(na przykład zdolność rozpraszania światła, lepkość, stopień krycia farb – są różne dla różnych typów mieszanin i osiągają maksimum przy rozdrobnieniach koloidalnych). Dla nas najistotniejszy jest sposób reakcji cząsteczek substancji rozproszonej na działanie siły grawitacji (rozdz. 12). Okazuje się, że reakcja ta jest najbardziej wyraźna dla zawiesin makroskopowych znajdujących się w bezruchu – ich cząstki opadają pod wpływem tej siły ku dołowi (gdy gęstość cząstki ρ_p jest większa od gęstości płynu rozpraszającego ρ , następuje *sedymencja*), lub wypływają pionowo ku górze (gdy $\rho_p < \rho$, następuje *flotacja*).

Grawitacyjna separacja jest natomiast pomijalnie mała dla cząsteczek koloidalnych, zaś zupełnie nie występuje w mieszaninach molekularnych (czyli w roztworach).

Jak już wspomniano, jeden ze składników układu złożonego nazywamy *ośrodkiem rozpraszającym* (w przypadku roztworów – *rozpuszczalnikiem*), zaś pozostałe – *substancjami rozproszonymi* (*rozpuszczonymi* w roztworach, lub *zawieszonymi* w układach wielofazowych).

Każda z tych substancji (rozpraszających i rozproszonych) może występować w innym stanie skupienia (jedynie gazy, ze względu na ogromną ruchliwość tworzących je molekuł, nie mogą tworzyć układów wielofazowych z innymi gazami). Zestawienie możliwych sytuacji wraz z przykładami podano w tabeli 2.

W dalszym ciągu rozważać będziemy jedynie *mieszaniny płynne* (gdy fazą rozpraszającą jest ciecz lub gaz), bowiem procesy rozpraszania i przenoszenia substancji w ciałach stałych mają odrębną specyfikę, a ze względu na to, że przebiegają niesłychanie wolno, nie stwarzają pod względem ekologicznym takiego problemu, jak migracja substancji rozproszonych w płynach (w wodach rzek, jezior, mórz i oceanów, w wodach podziemnych oraz w powietrzu atmosferycznym).

2.1.9. Energia cieplna

Dotychczas mówiliśmy o płynnych układach złożonych (czyli o płynach niejednorodnych). W szczególności interesują nas te układy, w których substancja rozproszona (lub większa liczba tych substancji) ma charakter szkodliwy lub jest niepożądana z innych względów (czyli stanowi *zanieczyszczenie*).

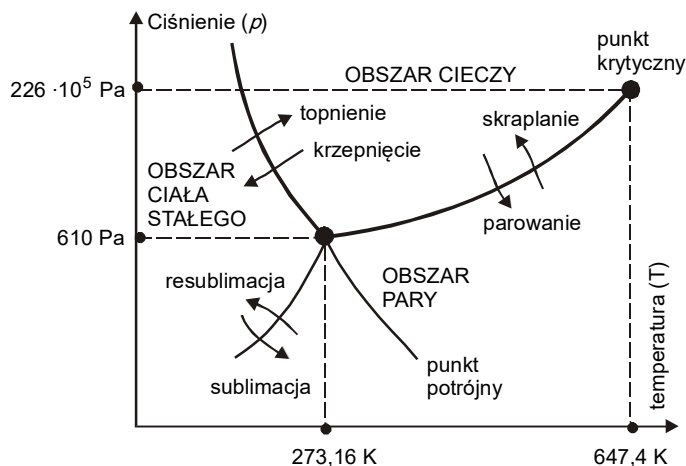
Jednakże z punktu widzenia potrzeb ochrony środowiska istotne znaczenie ma także energia cieplna. Umiejętność opisu procesu jej rozprzestrzeniania się w środowisku (lub w układach sztucznych) jest równie ważna, jak opis procesu migracji zanieczyszczeń materialnych. W dalszym ciągu będziemy więc traktowali energię cieplną jako odrębną kategorię „zanieczyszczenia energetycznego”.

2.1.10. Zmiany stanu skupienia. Rozpuszczalność

Przechodzenie substancji jednorodnych chemicznie z jednego stanu skupienia w inny może być realizowane jako jedna z sześciu *przemian fazowych*. Są to: *topnienie*, *krzepnięcie*, *parowanie*, *skraplanie*, *sublimacja*, *resublimacja* (rys. 2.4). Ze zmianą stanu skupienia wiążą się też niektóre z (wzajemnie odwrotnych) procesów *rozpuszczania* i *wytrącania*.

Generalnie rzecz biorąc, substancje w różnych stanach skupienia wykazują odmienną podatność na rozpuszczanie (czyli tworzenie mieszanin molekularnych). Gazy mieszają się ze sobą bez żadnych ograniczeń. Występują one natomiast przy mieszaniu się cieczy. Można tu wyróżnić trzy przypadki [1, 10]:

- nieograniczona wzajemna rozpuszczalność cieczy (gdy polarność ich cząsteczek jest do siebie zbliżona, na przykład woda i etanol);
- praktyczny brak wzajemnej rozpuszczalności (gdy cząsteczki cieczy wykazują odmienne typy polarności, jak na przykład woda, której cząsteczki mają znaczny moment dipolowy, praktycznie nie mieszająca się z benzenem, którego cząsteczki są zbudowane symetrycznie i niemal wcale nie wykazują momentu dipolowego);
- ograniczona rozpuszczalność wzajemna, uzależniona od temperatury (na przykład woda i eter).



Rys. 2.4. Wykres fazowy dla wody

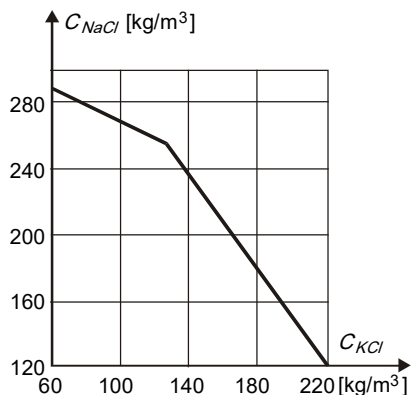
Jeszcze wyraźniejszym ograniczeniom podlegają procesy rozpuszczania gazów i ciał stałych w cieczach (związane z wyżej sygnalizowaną zmianą stanu skupienia substancji rozpuszczonej). Dla każdej substancji gazowej lub stałej, oraz dla każdego rozpuszczalnika ciekłego istnieją pewne maksymalne ilości materii (wyrażonej jako masa lub objętość), która może ulec rozpuszczeniu w jednostce masy lub objętości cieczy. Ta maksymalna ilość wyznacza *stężenie nasycenia* c_n .

Gazy rozpuszczają się w cieczach w niewielkich ilościach, z wyjątkiem tych, które wchodzi z rozpuszczalnikiem w reakcje chemiczne (na przykład amoniak lub chlorowódor w przypadku wody). Ich rozpuszczalność zależy (w przybliżeniu wyrażonym przez *prawo Henry'ego*) liniowo od ciśnienia, zaś maleje wraz ze wzrostem temperatury (z nielicznymi wyjątkami, jak na przykład hel, którego rozpuszczalność w wodzie rośnie z temperaturą).

Ciała stałe mogą rozpuszczać się w cieczach, jeżeli polarność ich molekuł jest pokrewna polarności molekuł rozpuszczalnika, lub jeżeli pod działaniem rozpuszczalnika ulegają przemianom (na przykład dysocjacji). Jeżeli proces rozpuszczania ciała stałego w cieczy jest *endotermiczny*, to stężenie nasycenia wzrasta wraz z temperaturą. Gdy jest on *egzotermiczny* (co ma miejsce dużo rzadziej) – rozpuszczalność maleje ze wzrostem temperatury (na przykład bezwodny Na_2SO_4 w wodzie).

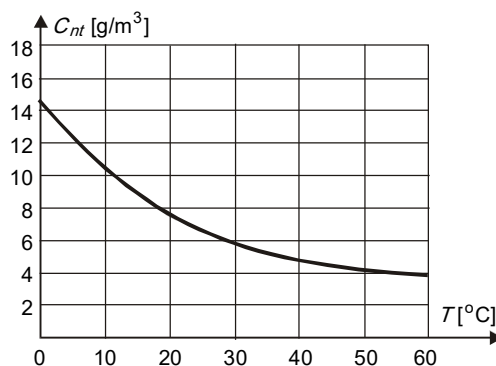
Przykładowe wartości stężeń nasycenia podano w tabeli 3 (dla wodnych roztworów niektórych soli) oraz w tabeli 4 (dla niektórych gazów).

Istotny wpływ na rozpuszczalność danej substancji ma obecność innych składników układu [1]. Przykładowy przebieg odpowiedniej zależności dla roztworu dwuskładnikowego ($NaCl$ oraz KCl) pokazano na rys. 2.5.



Na szczęście w podejmowanych tu zagadnieniach rozważać będziemy roztwory o raczej niskich stężeniach, dalekich od stanu nasycenia. Ten ostatni będzie nas interesował w zasadzie tylko w przypadku tlenu, rozpuszczonego w wodzie, pochodzącego z powietrza atmosferycznego (patrz podrozdz. 4.10). Odpowiednie stężenia nasycenia, w funkcji temperatury, pokazano na rys. 2.6.

Rys. 2.5. Wykres równowagi układu $NaCl-KCl-H_2O$ (wg [1])



Rys. 2.6. Stężenie nasycenia wody tlenem atmosferycznym (pod ciśnieniem normalnym)

Omawiane tu problemy zmian stanu skupienia składników mieszaniny w skali elementarnej są bardzo złożone i często nie do końca rozpoznane. Jednakże przy badaniu procesu migracji zanieczyszczeń interesuje nas ich opis w skali makroskopowej. Niekiedy zmiany te stanowią o istocie problemu. Na przykład wytrącające się z nagle ochłodzonego wilgotnego powietrza drobne cząsteczki wody (mgła) mogą rozpuszczać w sobie zawarte w powietrzu zanieczyszczenia gazowe. Łącząc się ze sobą (*koalescencja*) cząsteczki te opadają ku ziemi, doprowadzając w ten sposób na jej powierzchnię zanieczyszczenia, uprzednio znajdujące się w powietrzu. Częściej jednak rozważać będziemy przemiany fazowe towarzyszące adwekcji roztworu, czyli jego płynięcia wraz z nośnikiem (rozpuszczanie cząstek zawiesiny, wytrącanie cząstek nierozpuszczalnych związków, powstających w wyniku zachodzących w zanieczyszczonych płynach reakcji chemicznych itp.). W ujęciu technicznym procesy te opisujemy przy pomocy *funkcji źródłowych* (patrz podrozdz. 4.10).

2.2. Wielkości fizyczne, charakteryzujące układy niejednorodne

2.2.1. Uwagi ogólne

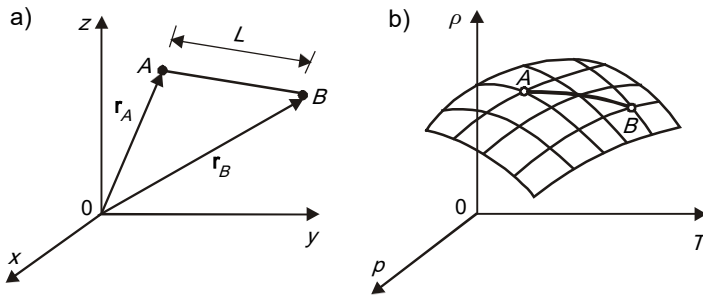
Każdy proces, przebiegający w naturze lub w warunkach technicznych, można opisać ilościowo (choć z różną dokładnością, zależnie od stopnia złożoności tego procesu), posługując się *wielkościami fizycznymi*.

Różne aspekty wielkości fizycznych znajdują swój wyraz w poszczególnych klasyfikacjach tego pojęcia. Ze względu na formalną postać zapisu mogą one być *skalarami* (na przykład temperatura, czas), *wektorami* (na przykład prędkość, siła) lub *tensorami* (na przykład stan naprężenia, współczynnik dyspersji w warunkach anizotropowych). Z kolei przyjmowane przez nie wartości liczbowe pozwalają podzielić wielkości fizyczne na *stałe* i *zmiennie*.

Stale są to wielkości fizyczne o wartości nieziennej, niezależnej od pozostałych wielkości. Wyrażają one podstawowe prawa natury, w tym prawa odnoszące się do budowy materii. Możemy wyróżnić *stałe uniwersalne* (zachowujące swą wartość i sens fizyczny niezależnie od indywidualnych cech rozważanych układów) oraz *stałe lokalne* (odnoszące się do konkretnych sytuacji, jak na przykład często stosowane w technice współczynniki we wzorach empirycznych). Do uniwersalnych stałych fizycznych należą między innymi stała Boltzmanna (wzór (2.5)), stała Plancka, prędkość światła w próżni, liczba Avogadra (par. 2.1.1), stała grawitacyjna i wiele innych.

Wszystkie pozostałe wielkości fizyczne (których wartości nie są stałe) nazywamy *zmiennymi*. Ze względów formalnych dzieli się je na *zmiennie zależne* oraz *zmiennie niezależne*. Charakter danej zmiennej uzależniony jest od rodzaju rozważanego zagadnienia. Z kolei ze względu na zastosowania wygodnie jest mówić o trzech typach zmiennych, którymi są odpowiednio:

- współrzędne wektora położenia \mathbf{r} (w układzie kartezjańskim $-x, y, z$ – rys. 2.7a),
- czas t ,
- wszystkie pozostałe wielkości fizyczne.



Rys. 2.7. Przestrzeń metryczna (a) i przestrzeń afiniczna (b)

2.2.2. Metody opisu wielkości fizycznych

Można wyróżnić dwa sposoby ilościowego opisu wielkości fizycznych – *metodę Eulera* oraz *metodę Lagrange'a*.

Zgodnie z pierwszą z nich każda z rozważanych wielkości fizycznych W jest funkcją wektora położenia \mathbf{r} oraz czasu t (\mathbf{r} oraz t są wtedy zmiennymi niezależnymi, zaś W – zmienną zależną)

$$W = W(\mathbf{r}, t). \quad (2.10)$$

Mówimy, że funkcja ta opisuje *pole wielkości fizycznej* W (skalarnej, wektorowej lub tensorowej). Metoda ta jest naturalna przy opisie stanów *układów ciągłych* (patrz par. 2.1.7).

Gdy jednak rozważamy ruch układów nieciągłych (dyskretnych), wygodnie jest jako zmienne niezależne przyjąć czas oraz jakąś wielkość identyfikującą poszczególne elementy układu. Najczęściej jest to początkowe położenie każdego z tych elementów (dane wektorem wodzącym \mathbf{r}_0), co prowadzi do drugiego ze sposobów opisu zjawiska – do metody Lagrange’a. Opisuje ona kolejne położenia elementów układu oraz inne wielkości fizyczne, które cechują te elementy, zgodnie z relacjami

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(\mathbf{r}_0, t), \quad W = W(\mathbf{r}_0, t). \quad (2.11)$$

Przestrzeń geometryczna, w której określamy poszczególne wielkości, najczęściej jest trójwymiarową przestrzenią Euklidesa. W przestrzeni takiej można określić długość wektora oraz kąt między wektorami, jak też zdefiniować pojęcie *odległości*, jako długości odcinka L , łączącego dwa punkty, na przykład punkty A i B na rys. 2.7a

$$L = |\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|. \quad (2.12)$$

Należy ona do kategorii *przestrzeni metrycznych*.

Jednakże często badamy nie tyle zmienność wielkości fizycznych w czasie i przestrzeni, lecz ich wzajemne relacje między sobą. W takiej sytuacji rolę zmiennej zależnej pełni ta wielkość, której reakcja na zmiany pozostałych wielkości nas interesuje. Przykładowo, klasyczne równanie stanu gazu doskonałego możemy zapisać jako wyrażenie, opisujące zależność ciśnienia od gęstości i temperatury (R – stała gazowa)

$$p = RT\rho. \quad (2.13)$$

Równie dobrze możemy jednak rozważać je jako zależność gęstości od ciśnienia i temperatury

$$\rho = p/RT. \quad (2.14)$$

Jeżeli każdej ze zmiennych przyporządkujemy jedną oś układu współrzędnych (rys. 2.7b), to otrzymamy *przestrzeń afiniczną*. Możemy w takiej przestrzeni wybrać dowolną parę punktów (na przykład A i B na rys. 2.7b), lecz pytanie o odległość między nimi nie ma sensu, gdyż wzdłuż każdej z osi mamy inną miarę. Obiektami w takiej przestrzeni zajmuje się *geometria afiniczna*. W ujęciu fizycznym przestrzeń taką nazywamy *przestrzenią stanu* [172].

Z innych aspektów wielkości fizycznych warto wspomnieć jeszcze o dwóch klasyfikacjach. Pierwsza z nich dotyczy *jednostek miar* tych wielkości i pozwala podzielić je na:

- *wielkości wymiarowe* (gdy ich wartości zależą od układu jednostek miar),
- *wielkości bezwymiarowe* (gdy wartości te w każdym układzie jednostek miar są takie same).

Drugi podział dotyczy wpływu rozmiarów układu na wartość danej wielkości. Mówimy tu o:

- *wielkościach ekstensywnych (globalnych)* – gdy ich wartości zależą od liczby molekuł, tworzących układ, na przykład masa, objętość, energia, ładunek elektryczny),
- *wielkościach intensywnych (lokalnych)* – gdy nie zależą one od liczby molekuł układu, na przykład temperatura, stężenie, ciśnienie, gęstość).

Wielkości intensywne są z reguły *gęstościami rozkładu* pokrewnych sobie wielkości ekstensywnych (patrz par. 2.2.6).

2.2.3. Bazowe wielkości fizyczne

Zasadnicza metoda wyznaczania interesujących nas wielkości fizycznych polega na rozwiązywaniu układów równań fizyki matematycznej, wynikających z praw natury.

Dla uzyskania jednoznacznego rozwiązania układ taki musi być *zamknięty*, czyli liczba równań, tworzących ten układ, musi być równa liczbie niewiadomych. Niejednokrotnie liczba równań jest mniejsza od liczby niewiadomych, a wtedy zestaw równań o podstawach fizycznych musi być uzupełniony na podstawie informacji dodatkowych (np. przepisów prawnych, doświadczenia zawodowego osoby rozwiązującej problem, lokalnych zwyczajów itd.).

Jako drugą metodę wyznaczania tych wielkości wymienić można pomiary. Trzeba jednak pamiętać, że każdy pomiar jest obciążony pewnym błędem, pomiary są kosztowne, a ponadto – co chyba najistotniejsze – pomiary można wykonywać tylko w układach już istniejących (lub w ich miarodajnych modelach).

Przy rozwiązywaniu różnych problemów interesują nas różne wielkości fizyczne. Jednakże możliwości i kolejność ich wyznaczania są zdeterminowane przez postacie równań fizyki matematycznej. W każdej dyscyplinie nauk przyrodniczych i technicznych sformułowane są pewne *bazowe układy równań*. Występujące w nich wielkości fizyczne nazwiemy również *wielkościami bazowymi*. Dopiero po ich wyznaczeniu (to jest po rozwiązaniu odpowiednich równań) możemy, korzystając z *równań pomocniczych*, wyznaczyć *pomocnicze wielkości fizyczne*.

W interesujących nas tu zagadnieniach migracji zanieczyszczeń bazowymi wielkościami fizycznymi są:

- prędkość płynu (niejednorodnego gdy rozważamy zanieczyszczenia materialne, zaś jednorodnego o zmiennej temperaturze gdy badamy ekologiczne aspekty transportu energii cieplnej),
- ciśnienie płynu,
- gęstość płynu,
- stężenie każdej z substancji rozproszonych (rozpuszczonych w przypadku roztworów, zaś zawieszonych w przypadku zawiesin),
- temperatura płynu.

W przypadku zawiesin może nas też interesować:

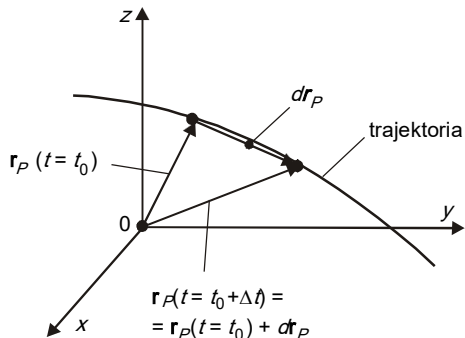
- aktualne położenie cząstek substancji zawieszonych (teoretycznie każdej z nich, zaś praktycznie – *cząstek charakterystycznych*, reprezentatywnych dla całej zawiesiny – patrz rozdz. 11).

Sens fizyczny i formalny wyżej wymienionych wielkości dla układów złożonych jest nieco inny niż dla układów prostych. Z tego względu musimy poświęcić im nieco uwagi.

2.2.4. Prędkość mieszania

Pojęcie prędkości najłatwiej można sobie przyswoić rozważając ruch punktu materialnego. Jeżeli dwa jego kolejne położenia (odpowiednio w czasie t_0 oraz $t_0 + dt$) różnią się nieskończenie krótkim wektorem $d\mathbf{r}_P$ (rys. 2.8), to prędkość punktu określona jest następującym wyrażeniem:

$$\mathbf{u}_P = \frac{d\mathbf{r}_P}{dt}. \quad (2.15)$$



Rys. 2.8. Ruch punktu materialnego

Zgodnie z omówionym już molekularnym modelem budowy płynu (podrozdz. 2.1), każdą jego cząsteczkę możemy traktować jako taki właśnie punkt materialny, którego prędkość może zmieniać się teoretycznie w dowolnym zakresie (od $-\infty$ do $+\infty$). Zmiennosc tej prędkości opisuje *funkcja rozkładu* f_R , zdefiniowana relacją (2.1). W ogólnym przypadku nie jest ona znana (dla gazów doskonałych mamy rozkład Maxwella-Boltzmana (2.2)), jednak nie przeszkadza nam to postulować jej istnienia dla każdego ze składników mieszaniny

$$f_{Ri} = f_{Ri}(x, y, z, u_{Pxi}, u_{Pyi}, u_{Pzi}, t). \quad (2.16)$$

($i = 0$ – ośrodek rozpraszający, $i = 1, \dots, I_m$ – substancje rozproszone).

Pole prędkości i -tego składnika mieszaniny określimy jako funkcję przestrzeni i czasu, uśrednioną lokalnie względem wszystkich możliwych wartości prędkości rzeczywistych molekuł tego składnika (patrz relacje (2.1) i (2.3))

$$\mathbf{u}_i = \frac{1}{N_{Mi}} \int \mathbf{u}_{Pi} dN_{Mi} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{u}_{Pi} f_{Ri} du_{Pxi} du_{Pyi} du_{Pzi}}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{Ri} du_{Pxi} du_{Pyi} du_{Pzi}}. \quad (2.17)$$

Można powiedzieć, że zastosowany tu model mieszaniny tworzą „nałożone” na siebie „obłoki” molekuł poszczególnych składników (od $i = 0$ do $i = I_m$), z których każdy porusza się z odrębną prędkością \mathbf{u}_i (rys. 2.9). Można jednak zdefiniować także jedną prędkość dla całej mieszaniny, sumując wpływy poszczególnych składników (z uwzględnieniem ich liczby oraz masy molekuł każdego z tych składników)

$$\mathbf{u}_b = \frac{\sum_{i=0}^{I_m} N_{Mi} m_i \mathbf{u}_i}{\sum_{i=0}^{I_m} N_{Mi} m_i}. \quad (2.18)$$

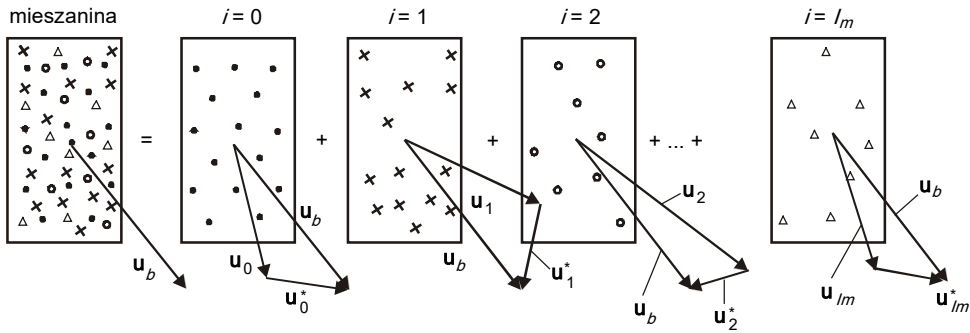
Uwzględniając definicje gęstości i stężenia (patrz par. 2.2.6), możemy ostatnią relację przepisać następująco:

$$\mathbf{u}_b = \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^{I_m} c_i \mathbf{u}_i. \quad (2.19)$$

Tak określoną wielkość fizyczną nazwiemy *prędkością barycentryczną*. Jest to *prędkość adwekcji mieszaniny* jako całości. Porównując ją z prędkościami adwekcji każdego ze

składników mieszaniny, możemy wprowadzić do rozważań *prędkości względne* poszczególnych składników

$$\mathbf{u}_i^* = \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_b. \quad (2.20)$$



Rys. 2.9. Schematyczna interpretacja składu mieszaniny i prędkości jej składników

Zdefiniowane powyżej prędkości w ujęciu ogólnym odnoszą się zarówno do mieszanin mikroskopowych (roztworów), jak i do zawiesin (makroskopowych i koloidalnych). Ich formalny sens, zawarty w relacjach (2.17), (2.19) i (2.20), jest dla wszystkich układów rozproszonych taki sam. Różni się natomiast ich sens fizyczny, będący wyrazem mechanizmów ruchu poszczególnych typów mieszanin, które zostaną omówione w dalszych rozdziałach. Tutaj zaznaczmy tylko, że prędkość względna \mathbf{u}_i^* dla substancji rozpuszczonych jest pewną wypadkową chaotycznego (termicznego) ruchu molekuł (*dyfuzja molekularna* – patrz par. 4.4.2). Zawiesiny koloidalne w nikłym stopniu odbierają chaotyczny ruch molekuł ośrodka rozpraszającego (*ruchy Browna* – patrz pkt 4.4.2.3), zaś ruch względny zawiesin makroskopowych jest konsekwencją sił zewnętrznych, działających na poszczególne ich cząstki.

2.2.5. Ciśnienie

Gęstość rozkładu sił powierzchniowych w ośrodku płynnym opisana jest *tensorem naprężenia* [101], który w kartezjańskim układzie współrzędnych można zapisać w postaci następującej tablicy:

$$[\mathbf{P}] = \begin{bmatrix} P_{xx} & P_{xy} & P_{xz} \\ P_{yx} & P_{yy} & P_{yz} \\ P_{zx} & P_{zy} & P_{zz} \end{bmatrix}. \quad (2.21)$$

Na jej głównej przekątnej znajdują się *naprężenia normalne*, zaś poza nią – *naprężenia styczne*. Uśrednione naprężenie normalne nazywamy *ciśnieniem (hydrodynamicznym)*, gdy płyn porusza się, zaś *hydrostatycznym* – gdy płyn jest nieruchomy)

$$p = -\frac{1}{3}(P_{xx} + P_{yy} + P_{zz}). \quad (2.22)$$

Powyższa definicja odnosi się do poziomu makroskopowego. W skali elementarnej ciśnienie wiążemy z zachowaniem się poszczególnych molekuł. W najprostszym ujęciu, znanym z kinetycznej teorii gazów, przyjmuje się, że ciśnienie gazu doskonałego wywołane jest idealnie sprężystymi zderzeniami jego cząsteczek ze ściankami, co pozwala powiązać ciśnienie p ze średnią prędkością kwadratową molekuł (zależność (2.7))

$$\overline{\rho u_p^2} = 3p. \quad (2.23)$$

W przypadku mieszaniny gazów doskonałych, wpływy molekuł różnych typów dodają się. W efekcie ciśnienie całkowite mieszaniny takich gazów jest sumą *ciśnień cząstkowych* (co jest treścią *prawa Daltona*), definiowanych dla każdego ze składników jako ciśnienie, które wywierałby ten składnik, gdyby sam wypełniał cały obszar.

Dla gazów rzeczywistych oraz dla cieczy jednorodnych (a tym bardziej dla cieczy niejednorodnych) sytuacja jest bardziej złożona [101]. Jednakże jej wyjaśnianie nie jest tu niezbędne, gdyż w dalszym ciągu będziemy ciśnienie traktowali jako zmienną makroskopową. Ma ona co prawda w mechanice płynów (także niejednorodnych) charakter wielkości bazowej, ale wynika to głównie z faktu, że w równaniach ruchu występuje wraz z prędkością, toteż w modelach o charakterze ogólniejszym często nie sposób wyznaczyć jednej z tych zmiennych bez drugiej. Istnieje jednak szereg modeli prostszych, które pozwalają w ogóle pominąć kwestię ciśnienia płynu (na przykład model płaskiego ruchu potencjalnego, lub model biharmoniczny [118]).

2.2.6. Gęstość i stężenie

Powszechnie używany termin „gęstość” ma w istocie rzeczy charakter określenia skróconego. W ścisłym ujęciu należałoby mówić o „gęstości rozkładu masy”. Jak wskazuje ta pełna nazwa, słowo „gęstość” określa lokalną intensywność „upakowania” molekuł materii w obszarze.

Termin ten zwyczajowo odnoszony jest do całości rozważanej substancji. Gdy jest ona chemicznie jednorodna, wtedy definiujemy dla niej gęstość ρ_0 w *warunkach normalnych* (najczęściej jako ciśnienie normalne przyjmuje się $p_0 = 101\,325$ Pa, zaś jako temperaturę normalną – $T_0 = 273,15$ K = 0°C , lub rzadziej $293,15$ K = 20°C). Wielkość ta ma charakter *stałej materiałowej*, a jej wartości dla różnych substancji znaleźć można w tablicach. W zagadnieniach inżynierii środowiska szczególnie ważne są następujące liczby:

gęstość wody dla 0°C	—	999,8	kg/m ³ ,
gęstość wody dla 20°C	—	998,2	kg/m ³ ,
gęstość powietrza	—	1,293	kg/m ³ ,
gęstość tlenu	—	1,429	kg/m ³ .

Ze zmianą temperatury i ciśnienia gęstość płynu jednorodnego ulega zmianom, opisywanym przez odpowiednie *równanie stanu* (patrz podrozdz. 4.5).

Gęstość płynów niejednorodnych (mieszanin) dodatkowo zależy od ilości rozproszonych w niej substancji.

Analogiczna do gęstości wielkość, opisująca intensywność rozkładu masy każdej z substancji rozproszonych w ośrodku rozpraszającym, nosi nazwę *stężenia* (lub *koncentracji*). Wykorzystując przyjęty powyżej sposób statystycznego opisu konfiguracji molekuł, którego istotą jest funkcja rozkładu f_R , liczbę tych molekuł w objętości $dV = dx dy dz$ dla

każdego ze składników mieszaniny możemy obliczyć za pomocą relacji (2.1). Pozwala to następująco określić stężenie i -tego składnika mieszaniny:

$$c_i = m_{i1} dN_{M_i}. \quad (2.24)$$

Sumując poszczególne stężenia (od $i = 0$ do $i = I_m$), otrzymamy *gęstość mieszaniny*

$$\rho = \sum_{i=0}^{I_m} c_i = \sum_{i=0}^{I_m} m_{i1} dN_{M_i}. \quad (2.25)$$

Podane wyżej definicje odnoszą się do skali elementarnej. Zgodnie z przyjętą tu zasadą, podaliśmy je dla uwypuklenia związku między strukturami na poziomie „mikro” (skala molekularna) oraz „makro” (skala techniczna). Do celów praktycznych stężenie i gęstość definiujemy jako iloraz masy ΔM_i lub objętość ΔV_i i -tego składnika mieszaniny oraz masy ΔM lub objętości ΔV próbki tej mieszaniny. Daje nam to cztery następujące kombinacje:

— stężenie masowo–objętościowe

$$c_i = \lim_{\Delta V \rightarrow \Delta V_g} \frac{\Delta M_i}{\Delta V}, \quad (2.26)$$

— stężenie objętościowe

$$c_{V_i} = \lim_{\Delta V \rightarrow \Delta V_g} \frac{\Delta V_i}{\Delta V}, \quad (2.27)$$

— stężenie masowe

$$c_{M_i} = \lim_{\Delta M \rightarrow \Delta M_g} \frac{\Delta M_i}{\Delta M}, \quad (2.28)$$

— stężenie objętościowo-masowe

$$c_{VM_i} = \lim_{\Delta M \rightarrow \Delta M_g} \frac{\Delta V_i}{\Delta M}. \quad (2.29)$$

W inżynierii środowiska bardzo często używamy pierwszej z tych możliwości, toteż w dalszym ciągu mianem *stężenia określać będziemy wartość c_i* , według (2.26). Czasem posługiwać się będziemy także stężeniem objętościowym, którego odwrotność nazywana jest *rozcieńczeniem*

$$s_{V_i} = 1/c_{V_i}. \quad (2.30)$$

Niekiedy miana rozcieńczenia używa się dla granicznej wartości stosunku objętości rozpuszczalnika do objętości substancji rozpuszczonej

$$d_{V_i} = \frac{1 - C_{V_i}}{C_{V_i}} = 1 - s_{V_i}. \quad (2.31)$$

Zauważmy, że masę próbki i -tej substancji ΔM_i oraz jej objętość ΔV_i wiąże gęstość materiału ρ_{0i} , zgodnie z następującą relacją:

$$\Delta M_i = \rho_{0i} \Delta V_i. \quad (2.32)$$

Podstawiając powyższe do (2.26) i uwzględniając (2.27), stwierdzamy, że

$$c_i = \rho_{0i} c_{Vi}. \quad (2.33)$$

Istnieje jeszcze jedna możliwość opisu ilości substancji rozproszonej, polegająca na podaniu liczby jej cząsteczek, zawartych w jednostce objętości lub masy mieszaniny. Pozwala to zdefiniować:

— stężenie liczbowo-objętościowe

$$c_{NVi} = \lim_{\Delta M_g \rightarrow \Delta M_g} \frac{\Delta N_i}{\Delta V}, \quad (2.34)$$

— stężenie liczbowo-masowe

$$c_{NMi} = \lim_{\Delta M \rightarrow \Delta M_g} \frac{\Delta N_i}{\Delta M}. \quad (2.35)$$

Stężenia ilościowe podawane są w sytuacjach nietypowych (na przykład stężenie pyłków roślinnych w powietrzu w porze kwitnienia, tak ważne dla alergików).

Przejścia graniczne (symbol „lim”) w powyższych relacjach z jednej strony podkreślają lokalność omawianych tu wielkości fizycznych (wielkość próbki mieszaniny musi być dużo mniejsza niż wielkość całego układu), zaś z drugiej – zapewniają spełnienie warunku ciągłości próbki (patrz warunek Knudsen (2.9), gdy L jest rozmiarem liniowym próbki mieszaniny, czyli gdy $\Delta V \sim L^3$).

2.2.7. Temperatura

Jak wiadomo z kinetycznej teorii budowy materii, temperatura substancji jest makroskopową wielkością fizyczną, która w skali elementarnej jest wyrażona przez kinetyczną energię chaotycznego ruchu molekuł ośrodka (równanie (2.8)).

3. METODY OPISU RUCHU MIESZANINY

3.1. Możliwości formalne

Przedstawiona w poprzednim rozdziale charakterystyka mieszanin pozwala na sformułowanie dwóch sposobów podejścia do problemu opisu stanu mieszaniny. Podejścia te są zresztą szczególnymi wariantami sytuacji ogólniejszych, spotykanych praktycznie w każdej dziedzinie nauk ścisłych i zastosowań technicznych. Możemy mianowicie potraktować badany układ (czyli w naszym przypadku roztwór lub zawiesinę) jako *ośrodek ciągły*, albo jako *system dyskretny (nieciągły)*.

W pierwszym ujęciu stan ośrodka można opisać funkcjami (w sensie matematycznym), określonymi w każdym punkcie tej części przestrzeni, którą zajmuje układ, oraz w czasie. Taką metodę opisu stanu układu nazwiemy *fenomenologiczną*.

Alternatywnie można przyjąć, że stan układu opisujemy przez podanie odpowiednich wielkości fizycznych, charakteryzujących każdy z jego elementów. W ten sposób zachowujemy indywidualną strukturę układu (utworzoną przez te elementy), toteż opartą na tej zasadzie metodę opisu stanu układu nazwać można *strukturalną*.

3.2. Metoda fenomenologiczna

W podrozdziale 2.2 wymienione zostały dwa aspekty, określające rangę każdej wielkości fizycznej – formalny i funkcjonalny. W metodzie fenomenologicznej z obu punktów widzenia za zmienne podstawowe należy uznać prędkość mieszaniny, stężenie każdej z substancji rozproszonych oraz/lub temperaturę.

Prędkość (par. 2.2.4), niezależnie od tego, że wpływa na wartości pozostałych zmiennych, sama w sobie jest wielkością niezwykle istotną. W zagadnieniach natury ekologicznej szczególnie ważna jest możliwość wyznaczania czasu, w jakim materia przebywa określony dystans. Czas ten należy bowiem do podstawowych parametrów przy rozwiązywaniu wielu zagadnień praktycznych. Czas przepływu substancji rozproszonej przez reaktor określa możliwość uzyskania efektywność zachodzących w nim przemian. Czas przemieszczania substancji szkodliwej od miejsca jej awaryjnej emisji do najbliższych skupisk ludzkich określa możliwość i zakres akcji ratunkowej. Obliczenie takich czasów charakterystycznych wymaga uprzedniego wyznaczenia właśnie prędkości.

Jeszcze bardziej oczywiste jest znaczenie stężenia i temperatury (par. 2.2.6 i 2.2.7) – opisują one intensywność przestrzennej i czasowej dystrybucji odpowiednio masy substancji rozproszonych oraz energii cieplnej.

Dwie pozostałe bazowe wielkości fizyczne (par. 2.2.3), czyli gęstość mieszaniny oraz ciśnienie, mają zdecydowanie mniejsze znaczenie funkcjonalne. Jednak ze względu na swe miejsce w równaniach opisujących interesujące nas zjawiska, bardzo często musimy je wyznaczać w trakcie obliczeń.

Rzecz oczywista, istnieje wiele innych wielkości fizycznych, które mają dla nas duże znaczenie funkcjonalne, lecz których wyznaczenie wymagać będzie uprzedniego rozwiązania bazowego układu równań. Będziemy je omawiać sukcesywnie, w trakcie dalszego wykładu.

Metoda fenomenologiczna jest naturalnym (także intuicyjnie) sposobem opisu zachowania się roztworów. Pozwala ona na jednolity opis wszystkich *procesów jednostkowych*, warunkujących przestrzenną i czasową ewolucję pola stężenia dla każdego ze składników oraz/lub pola temperatury (a więc jest związana z metodą Eulera – par. 2.2.2).

Jednakże od strony formalnej nic nie stoi na przeszkodzie, aby podjąć próbę zastosowania tej metody do opisu ruchu zawieszin (mieszanin wielofazowych). Zasadniczą trudność sprawia wtedy problem uwzględnienia *gravitacyjnej separacji zawiesziny* (to jest ruchu jej cząstek względem ośrodka rozpraszającego, spowodowanego różnicą między gęstością substancji rozproszonej a gęstością tego ośrodka). Z tego względu metodę fenomenologiczną omówimy najpierw w jej wersji podstawowej (to jest dla roztworów), a dopiero w następnej kolejności przedstawimy możliwość jej adaptacji dla ruchu zawieszin.

3.3. Metoda strukturalna

Ten z kolei sposób opisu ruchu mieszaniny można uznać za naturalny dla zawieszin, które ze swej istoty są układami nieciągłymi, nie tylko w skali elementarnej (jak roztwory), ale także w skali makroskopowej.

Zasadniczy element metody strukturalnej stanowi informacja o aktualnych (czyli odnoszących się do każdej chwili czasu t) położeniach elementów układu. Oznacza to, że jest ona związana z metodą Lagrange’a (par. 2.2.2). Położenia elementów układu (cząstek zawiesziny) opisane są przez ich promienie wodzące

$$\mathbf{r}_{Pj} = \mathbf{r}_{Pj}(t, \mathbf{r}_{P0j}), \quad (3.1)$$

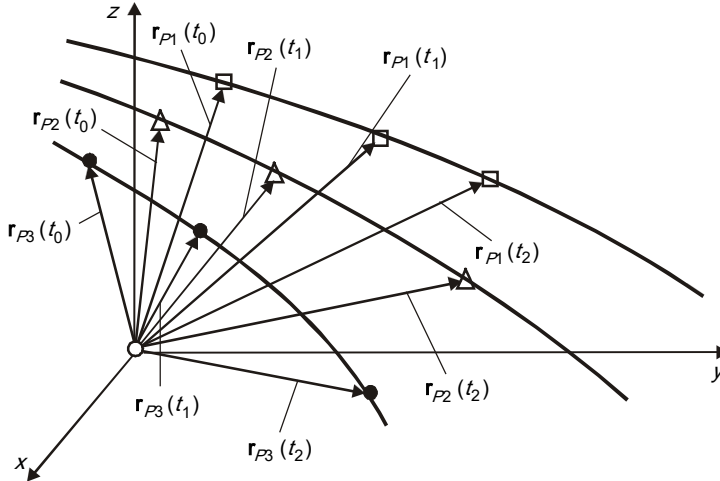
w ogólnym przypadku określone dla każdej cząstki zawiesziny ($j = 1, 2, \dots, J_m$). Końce tych promieni wodzących zakreślają z upływem czasu *tory* (lub *trajektorie*) poszczególnych cząstek (rys. 3.1).

Drugi, obok czasu t , argument w relacji (3.1), wielkość \mathbf{r}_{P0j} , określa charakterystyczne położenie j -ej cząstki. Najczęściej jest to położenie początkowe, dla $t = t_0$ (często $t_0 = 0$). Wprowadzenie tego argumentu jest niezbędne dla odróżnienia trajektorii i losów poszczególnych cząstek.

Dodatkowo charakterystyczne położenia (czyli „adresy”) cząstek muszą być powiązane z ich własnościami, od których zależy przebieg rozważanego zjawiska (czyli migracja zawiesziny w płynie rozpraszającym). Własności te zostaną omówione dalej (podrozdz. 11.2). Tutaj należy jeszcze podkreślić, że niejednokrotnie ulegają one zmianom w trakcie ruchu cząstek (przykładowo – rozpuszczanie substancji zawieszonyj w cieczy powoduje spadek masy i rozmiarów poszczególnych cząstek; spadek ciśnienia powoduje wzrost śred-

nicy znajdujących się w cieczy pęcherzyków gazu). W takich przypadkach każda z własności o numerze identyfikacyjnym k dla każdej z j cząstek musi być również opisana stosowną funkcją

$$W_{kj} = W_{kj}(t, \mathbf{r}_{P0j}). \quad (3.2)$$



Rys. 3.1. Opis ruchu zawiesiny metodą strukturalną

Korzystając z (3.1), można w powyższej relacji czas t zastąpić aktualnym położeniem cząstki \mathbf{r}_P , pisząc

$$W_{kj} = W_{kj}(\mathbf{r}_{Pj}, \mathbf{r}_{P0j}). \quad (3.3)$$

Tak więc kluczowym elementem w metodzie strukturalnej są kolejne konfiguracje rozważanego układu cząstek. Na rys. 3.1 pokazano trzy takie konfiguracje – w chwilach t_0 , t_1 oraz t_2 , dla układu utworzonego przez trzy cząstki.

Znając czasową zmienność tych konfiguracji możemy z relacji (2.15) łatwo obliczyć prędkość każdej z cząstek (o ile jest nam ona potrzebna). Ponadto dla każdej chwilowej konfiguracji możemy obliczyć aktualne stężenie masy substancji rozproszonej i gęstość całej zawiesiny (par. 2.2.6). Co więcej, możemy też pokusić się o wyznaczenie dla danej zawiesiny funkcji rozkładu (2.1) i wszystkich innych wielkości, które ona definiuje (na przykład prędkości barycentrycznej zawiesiny według (2.18)). Jednakże obliczenia takie, ze względu na ogromne liczby cząstek, tworzących w praktyce zawiesiny, byłyby niestety czasochłonne, toteż ich podejmowanie musiałyby być uprzednio uzasadnione.

Z tego samego powodu w metodzie fenomenologicznej nie staramy się również opisywać położenia każdej z cząstek zawiesiny, lecz jedynie ograniczamy się do opisu ruchu (jednej lub co najwyżej kilku) *cząstek charakterystycznych (miarodajnych)* dla danego układu. Zasady wyboru takich cząstek omówione będą w podrozdz. 11.1.

Część II

METODA FENOMENOLOGICZNA

4. KONTYNUALNY MODEL MIGRACJI ZANIECZYSZCZEŃ

4.1. Prawa fizyczne, wykorzystywane w metodzie fenomenologicznej

Sposób wyprowadzenia bazowego układu równań dla fenomenologicznej metody opisu ruchu mieszaniny niejednorodnej i jednofazowej (roztworu) jest w głównych zarysach taki sam, jak dla każdej innej klasy zagadnień mechaniki (uwzględniając wymianę ciepła) [45, 69, 101, 134, 169]. Pewna różnica polega na tym, że przy badaniu układów niejednorodnych poszczególne prawa fizyczne możemy stosować nie tylko dla całej mieszaniny (a dla całej substancji przy badaniu układów jednorodnych), lecz także możemy je pisać osobno dla każdego ze składników.

W pierwszej kolejności wykorzystujemy tu *prawa zachowania* (dla mieszaniny i dla poszczególnych jej składników)

- *masy*,
- *pędu (ilości ruchu)*,
- *momentu pędu (momentu ilości ruchu)*,
- *energii*.

Do powyższego zestawu można dołączyć jeszcze *prawo bilansu entropii*, ale jego przydatność ujawnia się podczas opisu procesów termodynamicznych, toteż w zagadnieniach migracji zanieczyszczeń nie będziemy się do niego odwoływali.

Wynikające z powyższych *praw równania zachowania* są ważne dla każdej substancji, niezależnie od jej stanu skupienia. Jednakże ich liczba jest mniejsza od liczby występujących w nich nieznanymi wielkościami fizycznymi. Z tego względu do równań tych musimy dołączyć relacje, wynikające z drugiego typu praw przyrody, a mianowicie *praw konstytutywnych*. Są to relacje, które pozwalają na opis indywidualnych charakterystyk poszczególnych kategorii substancji i procesów.

I wreszcie trzecim źródłem niezbędnych informacji jest *równanie stanu*, wyrażające związek między wielkościami opisującymi stan badanego układu.

Bazowy układ równań, otrzymany z wyżej wymienionych równań po wykonaniu wszystkich możliwych przekształceń (wraz z zestawem *równań pomocniczych*) w najbardziej ogólnym przypadku jest bardzo złożony. Z tego względu rozważa się jego różne wersje uproszczone. Wyróżnia się dwie kategorie stosowanych uproszczeń. Pierwsza z nich,

którą można określić mianem ogólnej, wynika z pewnych generalnych założeń wprowadzanych do równań, niezależnie od indywidualnych cech rozważanego układu. Do kategorii tej należą dwie bardzo ważne grupy modeli, a mianowicie:

- modele o zmiennych uśrednionych względem czasu, stosowane do opisu *turbulentnego (burzliwego) transportu masy i energii* (rozd. 6),
- modele o zmiennych uśrednionych względem niektórych zmiennych przestrzennych (które prowadzą do pojęcia *dyspersji masy i energii* – patrz rozdz. 7).

Do drugiej kategorii zaliczamy uproszczenia o charakterze jednostkowym. Uwzględniają one indywidualne cechy badanego układu, toteż każdorazowo musimy je wprowadzać do równań po dokonaniu identyfikacji tych cech. Oczywiście, obie kategorie uproszczeń można stosować jednocześnie.

Podkreśmy tu, że matematyczny opis procesów zachodzących w przyrodzie i technice jest najbardziej ogólnym, a jednocześnie najszybszym oraz najtańszym, narzędziem rozwiązywania problemów. Daje on możliwość wariantowego ujmowania zadań, w tym stosowania metod optymalizacyjnych (np. [61, 165]).

4.2. Równania zachowania dla układów niejednorodnych

4.2.1. Równanie zachowania masy dla dowolnego składnika mieszaniny

Punktem wyjścia jest tu następujące *prawo zachowania masy i-tego składnika mieszaniny*:

Zmiana w czasie masy i-tego składnika mieszaniny w objętości kontrolnej V równa jest sumie całkowitego strumienia masy tego składnika przez powierzchnię kontrolną S (P_{mi}) oraz intensywności jego źródeł (Z_{mi}).

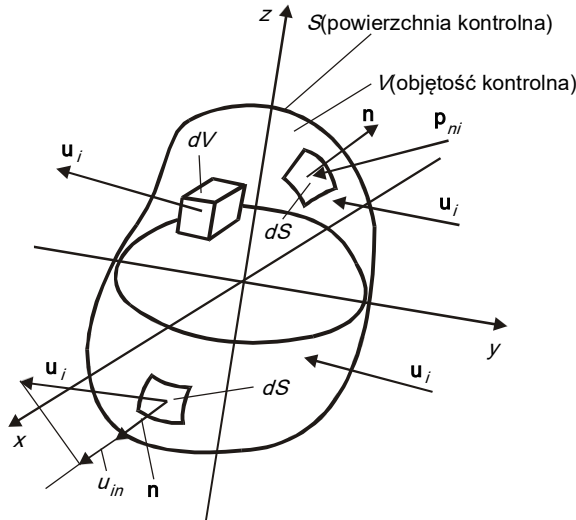
Mianem *objętości kontrolnej* określamy geometryczną objętość o dowolnym kształcie, ograniczoną przez zamkniętą niematerialną powierzchnię (zwaną *powierzchnią kontrolną*), całkowicie zanurzoną w rozważanej substancji. Ze względu na swój niematerialny charakter, powierzchnia kontrolna jest przepuszczalna dla materii (która może się przez nią swobodnie przemieszczać). Objętość kontrolna jest szczególnym rodzajem *objętości obserwacyjnej*, dla której formułujemy prawa fizyczne (podkreśmy: treść tych praw nie może zależeć od kształtu tej objętości). Objętość obserwacyjna, spełniając wyżej podane wymogi geometryczne, może poruszać się z dowolną prędkością \mathbf{u}_G . Jest to szczególnie wygodne przy opisie ruchu mieszanin. Dla substancji jednorodnych z kolei najczęściej prędkość objętości obserwacyjnej utożsamiamy z prędkością płynu ($\mathbf{u}_G = \mathbf{u}$), co prowadzi do pojęcia *objętości płynnej* [101]. Schemat objętości kontrolnej pokazano na rys. 4.1.

Sformułowane wyżej prawo zachowania masy możemy zapisać w postaci następującego wyrażenia:

$$\frac{\partial M_i}{\partial t} = P_{Mi} + Z_{Mi}. \quad (4.1)$$

Masę i -tej substancji, znajdującej się w określonym czasie w objętości V , wyrażamy bez trudu przy pomocy jej stężenia c_i (relacja 2.26) jako całkę

$$M_i = \int_V c_i dV. \quad (4.2)$$



Rys. 4.1. Ruch i -tego składnika mieszaniny w objętości kontrolnej V

Przenoszenie tej substancji przez powierzchnię S określa wektor jej prędkości \mathbf{u}_i (która jest zmienną określoną w skali makroskopowej, a której związek ze skalą elementarną określa relacja (2.17)). Ścisłej zaś – przenoszenie powoduje składowa tego wektora, prostopadła do powierzchni (bowiem tylko ta składowa z definicji zapewnia przecięcie powierzchni przez masę; składowa styczna powoduje jedynie ruch masy wzdłuż tej powierzchni, bez jej przecinania)

$$u_{in} = \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}. \quad (4.3)$$

Symbol \mathbf{n} określa wektor o jednostkowej długości ($|\mathbf{n}| = 1$), prostopadły do powierzchni S w każdym jej punkcie, jak to pokazano na rys. 4.1. Lokalny strumień i -tej substancji przez element powierzchni dS jest równy

$$dP_{Mi} = -c_i \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n} dS. \quad (4.4)$$

Znak „minus” w ostatniej relacji wynika z faktu, że wektor jednostkowy normalny \mathbf{n} uważany jest za dodatni wtedy, gdy jest zorientowany na zewnątrz powierzchni S , zaś strumień masy traktujemy jako dodatni wtedy, gdy skierowany jest do wnętrza tej powierzchni. Całkowity strumień masy określa całka

$$P_{Mi} = - \int_S c_i \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n} dS. \quad (4.5)$$

Trzeci człon relacji (4.1) wyraża wypadkowy proces przemian rozważanej substancji. Nie zawsze musi ona podlegać takim przemianom. Gdy tak jest, substancję nazywamy *trwałą* (nierozkładalną, chemicznie lub biologicznie bierną). Jednak w ogólnym przypadku musimy liczyć się z jej powstawaniem lub rozkładem w wyniku przemian chemicznych oraz/lub biologicznych. Mówimy wtedy, że jest to substancja *nietrwała* (rozkładalna, che-

micznie lub *biologicznie aktywna*), a odpowiednie procesy opisujemy *funkcjami źródłowymi*. Są one dodatnie wtedy, gdy substancja jest produkowana (źródła dodatnie), zaś ujemne – gdy opisują zanik tej substancji (źródła ujemne).

Każda substancja może podlegać jednocześnie wielu przemianom. Każdą z nich opisuje osobna funkcja źródłowa z_{ij} . Indeks „ i ” oznacza tu substancję, której produkcja lub rozkład nas interesuje, zaś indeks „ j ” – numer reakcji ($j = 1, 2, \dots, J_r$), toteż możemy napisać, że

$$Z_{Mi} = \sum_{j=1}^{J_r} \int_V z_{ij} dV. \quad (4.6)$$

Funkcje źródłowe z_{ij} omówione zostaną osobno w podrozdz. 4.10.

Podstawiając teraz (4.2), (4.5) i (4.6) do (4.1), otrzymamy następującą *całkową postać równania zachowania masy i-tego składnika mieszaniny*:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V c_i dV = - \int_S c_i \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS + \sum_{j=1}^{J_r} \int_V z_{ij} dV. \quad (4.7)$$

Występującą powyżej całkę po powierzchni S możemy zastąpić całką po objętości V , korzystając z twierdzenia Gaussa-Ostrogradskiego, które mówi, że dla każdej funkcji wektorowej \mathbf{f} zachodzi następująca relacja:

$$\int_S \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \text{div } \mathbf{f} dV. \quad (4.8)$$

Po wykonaniu prostych przekształceń możemy (4.7) przepisać w postaci jednej całki

$$\int_V \left[\frac{\partial c_i}{\partial t} + \text{div}(c_i \mathbf{u}_i) - \sum_{j=1}^{J_r} z_{ij} \right] dV = 0. \quad (4.9)$$

Przypomnijmy, że objętość kontrolna V została wybrana dowolnie. Oznacza to, że funkcja podcałkowa w relacji (4.9) musi być zawsze równa zero (w przeciwnym razie, ze względu na możliwość zmiany kształtu objętości V , całka (4.9) mogłaby być różna od zera). Ostatecznie możemy więc napisać następującą *różniczkową postać równania zachowania masy i-tego składnika mieszaniny*:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \text{div}(c_i \mathbf{u}_i) = \sum_{j=1}^{J_r} z_{ij}. \quad (4.10)$$

Równanie takie możemy napisać dla każdego składnika mieszaniny. Zgodnie z przyjętą konwencją indeks $i = 0$ oznacza ośrodek rozpraszający (rozpuszczalnik), zaś $i > 0$ – kolejne substancje rozpuszczone. W powstałym w ten sposób zestawie $(I_m + 1)$ równań występuje tyle samo prędkości makroskopowego ruchu składników mieszaniny \mathbf{u}_i . W dalszym ciągu wygodnie będzie nam wprowadzić do relacji (4.10) rozkład tych prędkości na sumę prędkości barycentrycznej całej mieszaniny \mathbf{u}_b oraz prędkości względnej każdego ze składników \mathbf{u}_i^* (relacja (2.20)). Pozwala nam to następująco przepisać ostatnie równanie:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \operatorname{div}(c_i \mathbf{u}_b) = \operatorname{div}(-c_i \mathbf{u}_i^*) + \sum_{j=1}^{J_r} z_{ij}. \quad (4.11)$$

Prędkość barycentryczna \mathbf{u}_b określa *adwekcję* i -tego składnika (czyli jego „płynięcie” wraz z płynem nośnym w przestrzeni), zaś iloczyn

$$\mathbf{m}_{ai} = c_i \mathbf{u}_b \quad (4.12)$$

wyraża *jednostkowy adwekcyjny strumień masy* i -tego składnika. Z kolei wielkość \mathbf{u}_i^* nazwiemy *prędkością dyfuzji* i -tego składnika (patrz par. 4.4.2), zaś

$$\mathbf{m}_{di} = c_i \mathbf{u}_i^* \quad (4.13)$$

– *jednostkowym dyfuzyjnym strumieniem masy* tego składnika.

4.2.2. Równanie zachowania masy mieszaniny

Równanie to można otrzymać, wykorzystując relację (2.25). Mówi ona, że gęstość mieszaniny jest sumą stężeń wszystkich jej składników. Sumując więc zależności typu (4.10) od $i = 0$ do $i = I_m$ oraz wykorzystując definicję prędkości barycentrycznej \mathbf{u}_b , można napisać, że

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}_b) = \sum_{i=0}^{I_m} \sum_{j=1}^{J_r} z_{ij} \quad (4.14)$$

Pożyteczne będzie porównanie tej relacji z równaniem zachowania masy dla płynu jednorodnego [101], które ma postać

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (4.15)$$

Widoczna różnica związana jest z członami opisującymi funkcje źródłowe. Zauważmy, że podczas ruchu roztworu możliwe są trzy następujące sytuacje:

— wszystkie składniki roztworu są chemicznie pasywne, toteż w układzie nie następują żadne przemiany i mamy zawsze

$$z_{ij} = 0; \quad (4.16)$$

— składniki roztworu są chemicznie aktywne, lecz produkty zachodzących reakcji są substancjami rozpuszczalnymi, a ich stężenie nie przekracza stężenia nasycenia, wobec czego

$$z_{ij} \neq 0; \quad (4.17)$$

— składniki roztworu są chemicznie aktywne, a przynajmniej niektóre produkty reakcji są substancjami nierozpuszczalnymi lub wydzielane są w takiej ilości, że ich aktualne stężenia nasycenia zostają przekroczone i nadmiar produktu wydziela się z roztworu, przechodząc z postaci rozpuszczonej do postaci zawiesiny, czyli

$$z_{ij} \neq 0. \quad (4.18)$$

Dla dwóch pierwszych przypadków sumaryczna funkcja źródłowa

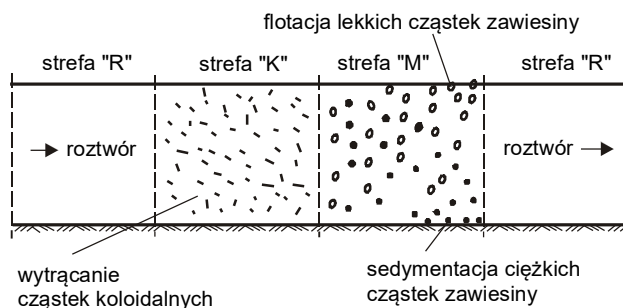
$$Z = \sum_{i=0}^{I_m} \sum_{j=2}^{J_r} Z_{ij} \quad (4.19)$$

jest równa zero (albo ze względu na brak przemian poszczególnych substancji, albo ze względu na wzajemną równowagę masy substratów i produktów zachodzących reakcji), zaś równanie (4.14) przyjmuje postać

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u}_b) = 0, \quad (4.20)$$

identyczną z postacią równania (4.15) dla substancji jednorodnej (gdyż prędkość adwekcji jest wtedy równa prędkości barycentrycznej).

W trzecim przypadku wartość sumarycznej funkcji źródłowej uzależniona jest od sposobu, w jaki będziemy traktowali rozważany układ. W strumieniu płynącej mieszaniny możemy wtedy wyróżnić trzy strefy, stosownie do przedstawionej na rys. 2.3 klasyfikacji układów złożonych. Przyjmijmy, że w stanie wyjściowym mamy do czynienia z roztworem (mieszanina jednofazowa – strefa R na rys. 4.2), z którego mogą wytrącać się związki nierozpuszczalne oraz/lub nadmiar związków rozpuszczalnych (ponad poziom nasycenia roztworu). W momencie pojawienia się cząstek takich związków, najpierw mieszanina przyjmuje charakter zawiesiny koloidalnej (gdyż cząstki te na początku procesu wytrącania mają bardzo małe rozmiary – strefa K na rys. 4.2), która następnie może przejść w zawiesinę makroskopową (w miarę ewentualnej koagulacji, koalescencji lub aglomeracji tych drobiniek – strefa M na rys. 4.2).



Rys. 4.2. Wpływ wytrącania substancji rozpuszczonych na skład mieszaniny

Cząsteczki tej zawiesiny mogą już wtedy ulegać grawitacyjnej separacji (opadając na dno strumienia, lub dochodząc do jego górnej powierzchni), toteż po pewnym czasie zostaną z płynu rozpraszającego usunięte i ponownie będziemy mieli do czynienia z roztworem (choć w stosunku do roztworu wyjściowego będzie on zubożony o wytrącone składniki).

Nasze obecne rozważania nad wartością funkcji Z (równanie (4.19)) dotyczą właśnie stref K i M (rys. 4.2). Mamy tu dwie możliwości – albo metodą fenomenologiczną opisywać będziemy tylko układ jednofazowy (roztwór będący płynem rozpraszającym dla zawiesiny), albo opiszemy w ten sposób całą mieszaninę (łącznie z drobinami zawiesiny). W pierwszym przypadku oczywiście $Z \neq 0$, a wtedy równanie zachowania masy (4.14) przyjmie postać

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}_b) = Z. \quad (4.21)$$

Model taki jest równoznaczny z założeniem, że wytrącona zawiesina zostanie szybko usunięta poza układ (innymi słowy, że wytrącanie substancji z roztworu jest równoznaczne z jej eliminacją z układu). Takie podejście jest dopuszczalne dla zawiesin makroskopowych o dużej prędkości grawitacyjnej separacji (dla dużych i ciężkich cząstek ciał stałych, dla dużych pęcherzyków gazu itp.). W niektórych zagadnieniach tego typu wpływ funkcji źródłowej może być bardzo znaczny. Przykładowo, podczas fermentacji osadów ściekowych z 1 kilograma substancji organicznych można uzyskać do 0,5 kg gazu, a po wydłużeniu czasu fermentacji nawet więcej [173], co oznacza spadek stężenia tych substancji o kilkadziesiąt procent.

W drugim z kolei przypadku, gdy mimo zmiany fazy części substancji rozproszonych nadal chcemy opisywać ruch układu jako całości, mamy $Z = 0$ i równanie zachowania masy mieszaniny ma postać (4.20). Byłby to przypadek zastosowania metody fenomenologicznej do opisu ruchu zawiesiny, dla której ośrodkiem rozpraszającym jest roztwór o zmiennym stężeniu. Podejście takie może być przydatne wtedy, gdy cząstki zawiesiny mają charakter koloidalny (patrz rozdz. 16).

4.2.3. Równanie zachowania pędu dla dowolnego składnika mieszaniny

Równanie zachowania masy dla jednego składnika mieszaniny (4.14) od odpowiedniego równania dla substancji jednorodnej (4.15) odróżnia człon źródłowy, opisujący przemiany, którym ta substancja podlega. Formułując pozostałe prawa zachowania dla poszczególnych składników układu również musimy uwzględnić stosowne konsekwencje tych przemian. *Prawo zachowania pędu* (lub *ilości ruchu*) dla *i*-tego składnika mieszaniny będzie więc brzmiało następująco:

*Zmiana w czasie pędu (\mathbf{I}_i) *i*-tego składnika mieszaniny w objętości kontrolnej V równa jest sumie całkowitego strumienia pędu tego składnika przez powierzchnię kontrolną (\mathbf{P}_{ii}), wypadkowej siły masowej (\mathbf{F}_{mi}), wypadkowej siły powierzchniowej (\mathbf{F}_{pi}) oraz funkcji opisującej intensywność przekazywania pędu *i*-temu składnikowi, związanej z jego przemianami (\mathbf{Y}_i).*

W zapisie symbolicznym mamy więc relację

$$\frac{\partial \mathbf{I}_i}{\partial t} = \mathbf{P}_{ii} + \mathbf{F}_{mi} + \mathbf{F}_{pi} + \mathbf{Y}_i. \quad (4.22)$$

Pęd w objętości kontrolnej V jest z definicji równy (rys.4.1)

$$\mathbf{I}_i = \int_V c_i \mathbf{u}_i dV. \quad (4.23)$$

Elementarny strumień pędu $d\mathbf{P}_{ii}$ (czyli liczba jednostek miary pędu, przemieszczająca się w jednostce czasu przez nieskończone mały element powierzchni kontrolnej dS) jest równy iloczynowi strumienia masy i prędkości tej masy, czyli

$$d\mathbf{P}_{ii} = dP_{Mi} \mathbf{u}_i = c_i u_{in} \mathbf{u}_i dS = -c_i (\mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_i) \mathbf{n} dS, \quad (4.24)$$

a wtedy całkowity strumień pędu określony jest całką

$$\mathbf{P}_{ii} = \int_S d\mathbf{P}_{ii}. \quad (4.25)$$

Wykorzystaliśmy tu zależność (4.3). Symbol „ \otimes ” oznacza *iloczyn diadyczny*, który dla dwóch wektorów \mathbf{A} i \mathbf{B} definiuje następująca macierz (tensor):

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} A_1 B_1 & A_1 B_2 & A_1 B_3 \\ A_2 B_1 & A_2 B_2 & A_2 B_3 \\ A_3 B_1 & A_3 B_2 & A_3 B_3 \end{bmatrix}. \quad (4.26)$$

Wypadkową siłę masową celowo jest przedstawić w postaci sumy dwóch składowych. Pierwsza z nich opisuje oddziaływania zewnętrzne, dane *gęstością rozkładu siły masowej zewnętrznej* \mathbf{f}_z , natomiast druga, opisana *gęstością rozkładu siły masowej wewnętrznej* \mathbf{f}_w^{ki} , pozwala uwzględnić ewentualne oddziaływania masowe każdego z k składników mieszaniny ($k = 1, 2, \dots, I_m, k \neq i$) na rozważany składnik i .

Gęstość rozkładu siły masowej jest z definicji graniczną wartością stosunku elementarnej siły masowej do masy elementu rozważanej substancji, toteż

$$\mathbf{f}_z = \lim_{\Delta m \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{F}_{mzi}}{\Delta m} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{F}_{mzi}}{c_i \Delta V} = \frac{1}{c_i} \lim_{\Delta m \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{F}_{mzi}}{\Delta V}, \quad (4.27)$$

zaś

$$\mathbf{f}_w^{ki} = \frac{1}{c_i} \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{F}_{mw}^{ki}}{\Delta V}. \quad (4.28)$$

Z sił masowych zewnętrznych, których działanie odgrywa rolę w inżynierii środowiska, należy w pierwszej kolejności wymienić *siłę ciężkości*

$$\Delta \mathbf{F}_{mzi} = \Delta \mathbf{G} = c_i \mathbf{g} \Delta V. \quad (4.29)$$

Podstawiając tę zależność do (4.27), stwierdzamy, że funkcja \mathbf{f}_z najczęściej określana będzie przez przyspieszenie ziemskie

$$\mathbf{f}_z = \mathbf{g}, \quad |\mathbf{g}| = g = 9,81 \text{ m/s}^2. \quad (4.30)$$

Niekiedy możemy też mieć do czynienia z *siłą odśrodkową* oraz z *siłami elektrostatycznymi*. Jednakże są one istotne tylko w technicznych obiektach ochrony środowiska (cyklony, elektrofiltry). W procesach migracji zanieczyszczeń praktycznie nie bierzemy ich pod uwagę.

Jeszcze rzadziej występują masowe oddziaływania pomiędzy składnikami mieszaniny (4.28). Byłoby to możliwe w specyficznych przypadkach, napotykanym raczej przy projektowaniu procesów przemysłowych (np. oddziaływania magnetyczne między różnymi składnikami mieszaniny), niż w zagadnieniach ochrony środowiska. Z tego względu funkcję \mathbf{f}_w^{ki} pozostawimy tylko w ogólnej wersji równania (4.22), bez jej bliższego określania.

Kolejny człon rozważanego tu równania zachowania pędu i -tego składnika mieszaniny, wypadkową siłę powierzchniową, otrzymamy, całkując rozkład naprężeń powierzchniowych \mathbf{p}_{ni} , wywieranych przez i -ty składnik mieszaniny, po powierzchni kontrolnej S

$$\mathbf{F}_{pi} = \int_S \mathbf{p}_{ni} dS. \quad (4.31)$$

Zgodnie z przyjętą w mechanice ośrodków ciągłych konwencją, rozkład ten opisany jest za pomocą *tensora naprężenia* $[P_i]$ (dla i -tego składnika)

$$\mathbf{p}_{ni} = [P_i] \mathbf{n}, \quad (4.32)$$

co pozwala napisać, że

$$\mathbf{F}_{pi} = \int_S [P_i] \mathbf{n} dS. \quad (4.33)$$

Aby opisać intensywność przekazywania pędu podczas reakcji między składnikami mieszanin (funkcja \mathbf{Y}_i w relacji (4.22)), wprowadźmy pomocnicze funkcje J^{jk} , z których każda określa liczbę jednostek masy k -tej substancji, odniesioną do jednostki objętości mieszaniny, która w jednostce czasu ulega przemianie (chemicznej, fizycznej lub biologicznej) w i -ty składnik tej mieszaniny. Są to funkcje ściśle związane z funkcjami źródłowymi z_{ij} (relacja (4.6)). Różnica między nimi polega na tym, że z_{ij} określa produkcję i -tej substancji w trakcie j -ej reakcji, zaś J^{ki} – produkcję tej substancji z k -tego składnika (patrz podrozdz. 4.10). Można więc napisać, że zmiana (przyrost lub ubytek) pędu i -tego składnika z tytułu jego produkcji lub rozkładu jest opisana relacją

$$\mathbf{Y}_i = \int_V \sum_{k=0}^{I_m} j^{ik} (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) dV. \quad (4.34)$$

Podstawiając omówione wyżej wyrażenia do relacji (4.22), otrzymamy następującą *całkową postać równania zachowania pędu i -tego składnika mieszaniny*:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_V (c_i \mathbf{u}_i) dV = & - \int_S c_i (\mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_i) \mathbf{n} dS + \int_V c_i (\mathbf{f}_z + \sum_{k=0}^{I_m} \mathbf{f}_w^{ki}) dV + \\ & + \int_S [P_i] \mathbf{n} dS + \int_V \sum_{k=0}^{I_m} J^{ik} (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) dV. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Aby sprowadzić je do postaci różniczkowej, wykorzystajmy twierdzenie Gaussa-Ostrogradskiego, pozwalające na przekształcenie całek powierzchniowych na całki objętościowe

$$\int_S c_i (\mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_i) \mathbf{n} dS = \int_S \operatorname{div} [c_i (\mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_i)] dV. \quad (4.36)$$

$$\int_S [P_i] \mathbf{n} dS = \int_V \operatorname{div} [P_i] dV. \quad (4.37)$$

Korzystając z niezmienności kształtu objętości kontrolnej V , możemy zmienić kolejność różniczkowania i całkowania w pierwszym członie (4.35), co pozwala całą tę relację zapisać jako jedną całkę objętościową

$$\begin{aligned} \int_V \left\{ \frac{\partial (c_i \mathbf{u}_i)}{\partial t} + \operatorname{div} [c_i (\mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_i)] - c_i \mathbf{f}_z - c_i \sum_{k=0}^{I_m} \mathbf{f}_w^{ki} + \right. \\ \left. - \operatorname{div} [P_i] - \sum_{k=0}^{I_m} J^{ik} (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) \right\} dV = 0. \end{aligned} \quad (4.38)$$

W efekcie możemy stwierdzić, że funkcja podcałkowa w powyższym wyrażeniu musi być zawsze równa zero (patrz komentarz między równaniami (4.9) i (4.10)). Po przeniesieniu części wyrażen na prawą stronę, otrzymamy następującą różniczkową postać rozważanego równania zachowania pędu *i*-tego składnika mieszaniny:

$$\frac{\partial(c_i \mathbf{u}_i)}{\partial t} + \operatorname{div}[c_i(\mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_i)] = c_i \mathbf{f}_z + \operatorname{div}[\mathbf{P}_i] + \sum_{k=0}^{I_m} [c_i \mathbf{f}_z^{ki} + J^{ik}(\mathbf{u}_{ik} - \mathbf{u}_i)]. \quad (4.39)$$

4.2.4. Równanie zachowania pędu mieszaniny

Podobnie jako to miało miejsce w przypadku równania zachowania masy (par. 4.2.2), sumując wyrażenia (4.39) od $i = 0$ (ośrodek rozpraszający) do $i = I_m$, otrzymamy relację dla mieszaniny jako całości.

Celem uproszczenia formy tego równania zauważmy, że zgodnie z (2.19) możemy pierwszą sumę członów wyrazić przez gęstość mieszaniny oraz jej prędkość barycentryczną. Sumę członów adwekcyjnych przekształćmy, wykorzystując (2.20), jak następuje:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{I_m} \operatorname{div}[c_i(\mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_i)] &= \operatorname{div} \sum_{i=0}^{I_m} [c_i(\mathbf{u}_b + \mathbf{u}_i^*) \otimes (\mathbf{u}_b + \mathbf{u}_i^*)] = \\ &= \operatorname{div} \sum_{i=0}^{I_m} [c_i(\mathbf{u}_b \otimes \mathbf{u}_b)] + \operatorname{div} \sum_{i=0}^{I_m} [c_i(\mathbf{u}_b \otimes \mathbf{u}_i^*)] + \operatorname{div} \sum_{i=0}^{I_m} [c_i(\mathbf{u}_i^* \otimes \mathbf{u}_b)] + \\ &+ \operatorname{div} \sum_{i=0}^{I_m} [c_i(\mathbf{u}_i^* \otimes \mathbf{u}_i^*)] = \operatorname{div}[\rho(\mathbf{u}_b \otimes \mathbf{u}_b)] + \operatorname{div} \sum_{i=0}^{I_m} [c_i(\mathbf{u}_i^* \otimes \mathbf{u}_i^*)]. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Uproszczenie powyższej sekwencji było możliwe dzięki temu, że zgodnie z (2.19) oraz (2.20)

$$\sum_{i=0}^{I_m} (c_i \mathbf{u}_i^*) = \sum_{i=0}^{I_m} (c_i \mathbf{u}_i) - \sum_{i=0}^{I_m} (c_i \mathbf{u}_b) = \rho \mathbf{u}_b - \rho \mathbf{u}_b = 0. \quad (4.41)$$

Trzecią sumę członów, określających zewnętrzne siły masowe, uprościmy do postaci

$$\sum_{i=0}^{I_m} c_i \mathbf{f}_z = \rho \mathbf{f}_z, \quad (4.42)$$

bowiem \mathbf{f}_z jest z definicji jednakowe dla wszystkich składników mieszaniny (opisuje oddziaływanie zewnętrzne względem tej mieszaniny).

Wprowadźmy efektywny tensor naprężenia dla całej mieszaniny $[\mathbf{P}]$, zgodnie z relacją

$$\sum_{i=0}^{I_m} \operatorname{div}[\mathbf{P}_i] = \operatorname{div} \sum_{i=0}^{I_m} [\mathbf{P}_i] = \operatorname{div}[\mathbf{P}]. \quad (4.43)$$

Dwie ostatnie sumy członów relacji (4.39) znikają, gdyż zgodnie z III prawem Newtona (akcja równa się reakcji)

$$c_i \mathbf{f}_w^{ki} = -c_k \mathbf{f}_w^{ik} \quad (4.44)$$

oraz

$$J^{jk}(\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i) = -J^{ki}(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_k). \quad (4.45)$$

Tym samym

$$\sum_{i=0}^{I_m} \sum_{k=0}^{I_m} [c_i \mathbf{f}_w^{ki} + J^{ik}(\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_i)] = 0, \quad (4.46)$$

zaś równanie zachowania pędu mieszaniny przyjmuje następującą postać:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u}_b)}{\partial t} + \text{div}[\rho(\mathbf{u}_b \otimes \mathbf{u}_b)] = \rho \mathbf{f}_z + \text{div}[\mathbf{P}] - \text{div}[\rho c_i(\mathbf{u}_i^* \otimes \mathbf{u}_i^*)]. \quad (4.47)$$

4.2.5. Równanie zachowania momentu pędu dla substancji niejednorodnej

Jak wiadomo z klasycznej mechaniki ośrodków ciągłych (np. [101, 172]), prawo zachowania momentu pędu nie dostarcza osobnego równania zachowania momentu pędu, lecz prowadzi do wniosku o charakterze tensora naprężenia.

Treść tego wniosku jest uzależniona od bilansu czynników, uwzględnianych przez prawo zachowania momentu pędu. W najczęściej stosowanym ujęciu mówi ono, co następuje:

Zmiana w czasie momentu pędu \mathbf{M}_P substancji jednorodnej lub i -tego składnika mieszaniny w objętości kontrolnej V jest równa sumie całkowitego strumienia momentu pędu tej substancji lub składnika przez powierzchnię kontrolną \mathbf{P}_{MP} , momentowi wypadkowej siły masowej \mathbf{M}_{PM} , momentowi wypadkowej siły powierzchniowej \mathbf{M}_{PP} oraz (dla składników ulegających przemianom chemicznym) – funkcji opisującej intensywność przekazywania momentu pędu i -temu składnikowi podczas przemiany każdego z reagujących składników \mathbf{M}_{PY} .

Powyższe prawo zapisujemy w postaci równania

$$\frac{\partial \mathbf{M}_P}{\partial t} = \mathbf{P}_{MP} + \mathbf{M}_{PM} + \mathbf{M}_{PP} + \mathbf{M}_{PY}, \quad (4.48)$$

które po wykonaniu klasycznych przekształceń (np. [101]) pozwala stwierdzić, że w ramach ważności powyższego sformułowania *tensor naprężenia jest symetryczny*, czyli

$$P_{ij}^i = P_{ji}^j. \quad (4.49)$$

Uwzględniając (4.43) możemy więc powiedzieć, że symetryczny jest również tensor naprężenia całej mieszaniny $[\mathbf{P}]$.

Jednakże możemy także rozważyć przypadek, w którym analizowana substancja wykazuje mikrostrukturę (przykładowo – każdy element masy ma tendencję do wykonywania samodzielnych obrotów). Przyjmując, że struktura ta jest opisana lokalnym momentem, którego intensywność na jednostkę masy dana jest funkcją \mathbf{m}_M , do prawej strony relacji (4.48) musimy dopisać wypadkowy moment źródłowy

$$\mathbf{M}_{MM} = \int_V \rho \mathbf{m}_M dV. \quad (4.50)$$

W konsekwencji równanie zachowania momentu pędu doprowadzi nas do konkluzji, że tensor naprężenia nie jest symetryczny [101], przy czym ($i, j, k = x, y, z$)

$$P_{ij} - P_{ji} = m_{Mk}. \quad (4.51)$$

W mechanice ciała stałego przykładem ośrodka z mikrostrukturą momentową są tak zwane ośrodki Cosseratów [86]. W mechanice płynów jednorodnych mikrostrukturę momentową można odnieść do turbulencji [127]. Dla płynów niejednorodnych strukturę momentową można powiązać z cząsteczkami zawiesziny w układzie niejednofazowym. Jednakże jest to tylko możliwość formalna, toteż w dalszym ciągu będziemy posługiwać się relacją (4.49).

4.2.6. Równanie zachowania energii dla dowolnego składnika mieszaniny

Prawo zachowania energii dla każdego ze składników układu złożonego można ująć w następującą formułę:

Zmiana w czasie całkowitej energii kinetycznej E_{KCi} i -tego składnika mieszaniny w objętości kontrolnej równa jest sumie całkowitego strumienia tej energii przez powierzchnię kontrolną P_{Ei} , mocy sił masowych N_{Mi} , mocy sił powierzchniowych N_{Pi} , intensywności wewnętrznych źródeł energii w objętości kontrolnej N_{Di} oraz intensywności przekazywania energii i -temu składnikowi, związanego z jego przemianami N_{Ri} .

Ma więc ono postać następującego bilansu:

$$\frac{\partial E_{KCi}}{\partial t} = P_{Ei} + N_{Mi} + N_{Pi} + N_{Di} + N_{Ri}. \quad (4.52)$$

Całkowitą energię kinetyczną i -tego składnika w objętości kontrolnej przedstawimy jako sumę energii kinetycznej ruchu makroskopowego z prędkością \mathbf{u}_i (relacja 2.18) oraz jego energii wewnętrznej, opisanej gęstością rozkładu e_i . Mamy więc

$$E_{KCi} = \int_V c_i E_{Ki} dV = \int_V c_i \left(\frac{u_i^2}{2} + e_i \right) dV. \quad (4.53)$$

Strumień tej energii przez powierzchnię kontrolną S wyraża się całką powierzchniową

$$P_{Ei} = - \int_S c_i E_{Ki} \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n} dS = - \int_S c_i \left(\frac{u_i^2}{2} + e_i \right) \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n} dS, \quad (4.54)$$

którą, korzystając z twierdzenia Gaussa-Ostrogradskiego, możemy zastąpić przez całkę objętościową

$$P_{Ei} = - \int_V \operatorname{div} \left[c_i \left(\frac{u_i^2}{2} + e_i \right) \mathbf{u}_i \right] dV = - \int_V \operatorname{div} [c_i E_{Ki} \mathbf{u}_i] dV. \quad (4.55)$$

Siły masowe określone są przez swą gęstość rozkładu (4.27), wobec czego

$$N_{Mi} = \int_V c_i \mathbf{f}_z \mathbf{u}_i dV. \quad (4.56)$$

Wykorzystując teraz (4.32) oraz ponownie twierdzenie Gaussa-Ostrogradskiego, możemy następująco wyrazić moc sił powierzchniowych:

$$N_{Pi} = \int_S [P_i] \mathbf{u}_i \mathbf{n} dS = \int_V \operatorname{div}([P_i] \mathbf{u}_i) dS. \quad (4.57)$$

Intensywność wewnętrznych źródeł energii (czyli reakcji egzo- bądź endotermicznych) opisuje odpowiednia gęstość rozkładu q_i , wobec czego

$$N_{Di} = \int_V c_i q_i dV. \quad (4.58)$$

Ostatni człon bilansu (4.52) możemy wyrazić, korzystając ze zdefiniowanej w punkcie 4.2.3. funkcji J^{ik} (równ. (4.34)), posługując się jednostkową energią kinetyczną i -tego składnika E_{Ki} (równ. 4.53) oraz odpowiednią wartością tej energii E_{Kk} (dla tej części składnika o indeksie k , która ulega przemianie w składnik o indeksie i). Mamy wtedy

$$N_{Ri} = \int_V \sum_{k=0}^{I_m} J^{ik} (E_{Kk} - E_{Ki}) dV. \quad (4.59)$$

Po wstawieniu wyżej sformułowanych relacji do (4.52), możemy wszystkie człony tego wyrażenia zapisać pod znakiem jednej całki objętościowej (zmieniając też kolejność różniczkowania względem czasu i całkowania w wyrażeniu po lewej stronie (4.52) oraz pamiętając, że dwie całki powierzchniowe (4.55) i (4.57) zamieniliśmy na całki objętościowe, korzystając z twierdzenia Gaussa-Ostrogradskiego). Całka ta będzie równa zero (bowiem wszystkie człony równania przenieśliśmy na jedną stronę), toteż możemy ponownie wykorzystać znaną już konkluzję, że wobec dowolności obszaru całkowania V funkcja podcałkowa jest tożsamościowo równa zero. W rezultacie otrzymamy następujące *równanie zachowania energii dla i -tego składnika mieszaniny*:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (c_i E_{Ki}) + \operatorname{div}[c_i E_{Ki} \mathbf{u}_i] &= c_i \mathbf{f}_z \mathbf{u}_i + \operatorname{div}([P_i] \mathbf{u}_i) + c_i q_i + \\ &+ \sum_{k=0}^{I_m} J^{ik} (E_{Kk} - E_{Ki}). \end{aligned} \quad (4.60)$$

4.2.7. Równanie zachowania energii dla mieszaniny

Konsekwentnie sumując relacje (4.60) dla kolejnych składników układu (od $i = 0$ do $i = I_m$), otrzymamy równanie zachowania energii dla mieszaniny jako całości.

Zdefiniujmy gęstość rozkładu całkowitej energii kinetycznej mieszaniny jako

$$E_K = \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^{I_m} c_i E_{Ki}. \quad (4.61)$$

Aby wprowadzić tę wielkość do członu adwekcyjnego, przedstawimy prędkość każdego składnika \mathbf{u}_i jako sumę prędkości barycentrycznej \mathbf{u}_b oraz prędkości względnej \mathbf{u}_i^* , zgodnie z (2.20), co pozwala napisać, że

$$\sum_{i=0}^{I_m} \operatorname{div}(c_i E_{Ki} \mathbf{u}_i) = \operatorname{div}(\rho E_K \mathbf{u}_b) + \sum_{i=0}^{I_m} \operatorname{div}(c_i E_{Ki} \mathbf{u}_i^*). \quad (4.62)$$

Suma udziałów mocy sił masowych, wobec niezależności \mathbf{f}_z (jako czynnika zewnętrznego względem mieszaniny) od charakteru i -tego składnika, jest równa

$$\sum_{i=0}^{I_m} c_i \mathbf{f}_z \mathbf{u}_i = \rho \mathbf{f}_z \mathbf{u}_b. \quad (4.63)$$

Zgodnie z (2.20) i (4.43) możemy napisać, że

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{I_m} \operatorname{div}([P_i] \mathbf{u}_i) &= \sum_{i=0}^{I_m} \operatorname{div}([P_i] \mathbf{u}_b) + \sum_{i=0}^{I_m} \operatorname{div}([P_i] \mathbf{u}_i^*) = \\ &= \operatorname{div}([P] \mathbf{u}_b) + \sum_{i=0}^{I_m} \operatorname{div}([P_i] \mathbf{u}_i^*). \end{aligned} \quad (4.64)$$

Wypadkową intensywność wewnętrznych źródeł energii mieszaniny q_e zdefiniujemy jako

$$q_e = \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^{I_m} c_i q_i. \quad (4.65)$$

Suma ostatnich członów relacji (4.60) będzie równa zero, bowiem analogicznie do (4.45) mamy

$$J^{ik} (E_{Kk} - E_{Ki}) = -J^{ki} (E_{Ki} - E_{Kk}). \quad (4.66)$$

Po uporządkowaniu powyższych zależności otrzymamy ogólną postać równania zachowania energii mieszaniny

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho E_K)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho E_K \mathbf{u}_b) &= \rho \mathbf{f}_z \mathbf{u}_b + \operatorname{div}([P] \mathbf{u}_b) + \rho q_e + \\ &+ \sum_{i=0}^{I_m} \operatorname{div}([P_i] \mathbf{u}_i^*) - \sum_{i=0}^{I_m} \operatorname{div}(c_i E_{Ki} \mathbf{u}_i^*). \end{aligned} \quad (4.67)$$

4.3. Zestawienie i wstępne uproszczenie ogólnych równań zachowania

Każde z wyprowadzonych w podrozdz. 4.2 równań zachowania masy, pędu i energii możemy napisać $(I_m + 2)$ razy – dla ośrodka rozpraszającego ($i = 0$), dla każdej z I_m substancji rozproszonych ($i = 1, 2, \dots, I_m$) oraz dla całej mieszaniny. Uwzględniając, że wektorowe równanie zachowania pędu jest równoważne trzem relacjom skalarnym, łączna liczba równań zachowania w wersjach skalarnych, które mamy do dyspozycji, wynosi $(5I_m + 10)$.

Występuje w nich $(11I_m + 22)$ skalarnych wielkości fizycznych, które mają charakter nieznanymi zmiennymi zależnych, opisujących rozważane przez nas procesy przenoszenia masy i energii w układach złożonych. Są to:

- stężenie każdego ze składników mieszaniny c_i ;
- gęstość całej mieszaniny ρ ;
- trzy skalarne składowe wektora prędkości względnej każdego ze składników mieszaniny \mathbf{u}_i^* ;
- trzy składowe prędkości barycentrycznej mieszaniny \mathbf{u}_b ;
- po sześć niezależnych składowych tensora naprężenia dla każdego ze składników mieszaniny $[P_i]$; wykorzystaliśmy tutaj wniosek z równania zachowania momentu pędu (4.49), pozwalający dzięki symetrii rozważać tylko sześć składowych każdego z tych tensorów;
- sześć składowych tensora naprężenia dla mieszaniny $[P]$;
- gęstość rozkładu całkowitej energii kinetycznej dla każdego ze składników mieszaniny E_{Ki} ;
- gęstość rozkładu całkowitej energii kinetycznej mieszaniny E_K .

Niezależnie od równań zachowania, do dyspozycji mamy jeszcze 11 skalarnych relacji, wyrażających związki między zmiennymi dla składników a zmiennymi dla mieszaniny, czyli

- trzy skalarne składowe definicji prędkości barycentrycznej (2.19);
- definicja gęstości mieszaniny (2.25);
- sześć skalarnych składowych definicji tensora naprężenia mieszaniny (4.43);
- definicja gęstości rozkładu całkowitej energii kinetycznej mieszaniny (4.61).

Poza zmiennymi wyżej wymienionymi, w wyprowadzonych równaniach występuje jeszcze wiele innych wielkości fizycznych – dwa typy funkcji źródłowych (z_{ij} oraz J^{jk}), gęstości rozkładu masowej siły zewnętrznej (\mathbf{f}_w^{ki}) oraz intensywności wewnętrznych źródeł energii (q_e dla mieszaniny oraz q_i dla jej poszczególnych składników).

Jednakże nie mają one charakteru zmiennych procesu przenoszenia masy i energii, gdyż opisują własności substancji rozproszonych oraz zachodzących między nimi procesów. Wielkości te opisane muszą być odpowiednimi funkcjami (z których najważniejsze omówione będą w podrozdz. 4.10). Ich postacię wynikają ze składu chemicznego rozważanej mieszaniny.

Ponadto w równaniach naszych występują indywidualne prędkości składników mieszaniny \mathbf{u}_i , ale dla każdej z nich mamy relację (2.20), wiążącą tę wielkość z prędkościami \mathbf{u}_b i \mathbf{u}_i^* .

Tak więc w sumie liczba niewiadomych jest o wartość

$$(11I_m + 22) - (5I_m + 10 + 11) = (6I_m + 1)$$

większa od liczby dotychczas wyprowadzonych równań.

W celu otrzymania zamkniętego układu równań, bazowego dla metody fenomenologicznej (patrz par. 2.2.3), należy znaleźć jeszcze $(6I_m + 1)$ równań. Będą to relacje oddające indywidualne cechy poszczególnych rodzajów substancji i procesów, wyprowadzone (jak już wspomniano w podrozdz. 4.1) z praw konstytutywnych i praw stanu.

Treści tych praw muszą wynikać z rezultatów pomiarów zmiennych i z obserwacji przebiegów interesujących nas procesów. Zanim więc przystąpimy do ich formułowania, należy zastanowić się nad możliwościami mierzenia lub przewidywania teoretycznego wielkości fizycznych, zestawionych na początku tego paragrafu.

Okazuje się, że możliwości takie istnieją dla wszystkich zmiennych odnoszących się do mieszaniny jako całości. Jeśli natomiast chodzi o zmienne dla poszczególnych składników, to możliwość pomiaru mamy tylko dla stężeń poszczególnych składników (c_i). Stężenia te pozwalają na drodze teoretycznej obliczyć prędkości względnego ruchu składników względem mieszaniny (patrz par. 4.4.2), ale pozostałych zmiennych dla tych składników praktycznie nie można

wyznaczyć. W szczególności dotyczy to tensorów $[P_i]$ – jak dotychczas nawet nie zaproponowano eksperymentu, pozwalającego mierzyć jego składowe, bezpośrednio lub pośrednio [146].

Wobec tego celowa jest rezygnacja z rozważania równań zachowania pędu i energii dla składników mieszaniny, a pozostawienie w układzie tylko równań zachowania masy dla każdego z tych składników.

Korzystając z postaci równania zachowania masy mieszaniny (4.20), możemy uprościć równania (4.47) i (4.67). W tym celu przekształćmy ich lewe strony, jak następuje:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \mathbf{u}_b)}{\partial t} + \operatorname{div}[\rho(\mathbf{u}_b \otimes \mathbf{u}_b)] &= \mathbf{u}_b \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial \mathbf{u}_b}{\partial t} + \mathbf{u}_b \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}_b) + \rho(\mathbf{u}_b \nabla) \mathbf{u}_b = \\ &= \mathbf{u}_b \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}_b) \right] + \rho \frac{\partial \mathbf{u}_b}{\partial t} + \rho(\mathbf{u}_b \nabla) \mathbf{u}_b = \rho \frac{D \mathbf{u}_b}{Dt}, \end{aligned} \quad (4.68)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho E_K)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho E_K \mathbf{u}_b) &= E_K \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial E_K}{\partial t} + E_K \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}_b) + \rho(\mathbf{u}_b \nabla) E_K = \\ &= E_K \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}_b) \right] + \rho \frac{\partial E_K}{\partial t} + \rho(\mathbf{u}_b \nabla) E_K = \rho \frac{D E_K}{Dt}. \end{aligned} \quad (4.69)$$

Wprowadziliśmy powyżej symbol *operatora pochodnej substancjalnej* [134]

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla), \quad (4.70)$$

w którym operator pochodnej adwekcyjnej jest iloczynem skalarnym wektora prędkości i symbolicznego operatora wektorowego *nabla*

$$\mathbf{u} \nabla = u_x \frac{\partial}{\partial x} + u_y \frac{\partial}{\partial y} + u_z \frac{\partial}{\partial z}. \quad (4.71)$$

Kolejne uproszczenie postaci dotyczy równania zachowania energii. Zgodnie z (4.53) i (4.61)

$$E_K = \frac{u_b^2}{2} + e. \quad (4.72)$$

Jeżeli równania zachowania pędu (4.47), z uwzględnieniem (4.68), obustronnie pomnożymy skalarnie przez prędkość mieszaniny \mathbf{u}_b , to otrzymamy

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{u_b^2}{2} \right) = \rho \mathbf{f}_z \mathbf{u}_b + \mathbf{u}_b \operatorname{div}[\mathbf{P}] - \mathbf{u}_b \operatorname{div} \sum_{i=0}^{I_m} [c_i (\mathbf{u}_i^* \otimes \mathbf{u}_i^*)]. \quad (4.73)$$

Odejmijmy teraz tę relację stronami od (4.67), z uwzględnieniem (4.69). W rezultacie część członów równania zachowania energii mieszaniny zniknie i otrzymamy jego wersję uproszczoną (lecz w pełni równoważną wersji wyjściowej)

$$\begin{aligned} \rho \frac{D e}{Dt} &= \operatorname{div}[\mathbf{P}] \mathbf{u}_b - \mathbf{u}_b \operatorname{div}[\mathbf{P}] + \rho q_e + \sum_{i=0}^{I_m} (\operatorname{div}[\mathbf{P}_i] \mathbf{u}_i^*) + \\ &+ \mathbf{u}_b \operatorname{div} \sum_{i=0}^{I_m} (c_i \mathbf{u}_i^* \otimes \mathbf{u}_i^*) - \operatorname{div} \sum_{i=0}^{I_m} c_i \frac{u_i^2}{2} \mathbf{u}_i^* - \operatorname{div} \sum_{i=0}^{I_m} c_i e_i \mathbf{u}_i^*. \end{aligned} \quad (4.74)$$

Jak wiadomo z podstawowego kursu mechaniki płynów [101], dwa pierwsze człony po prawej stronie ostatniego równania opisują przyrost wewnętrznej energii płynu, wynikający z przemiany energii mechanicznej w ciepłą (co potocznie określa się mianem *strat energii mechanicznej*, zachodzących w wyniku *procesu dyssypacji kinetycznej energii płynu*) podczas ruchu tego płynu z prędkością u_b .

Przykład 4.1

Oszacować rząd wielkości przyrostu temperatury wody w rzece, wynikający ze strat energii mechanicznej, związanych z podtrzymywaniem ustalonego i jednostajnego przepływu tej wody.

Rozwiązanie

Jak wiadomo z teorii przepływów ze swobodną powierzchnią [134], miarą straty energii mechanicznej podczas ustalonego i jednostajnego przepływu cieczy w korycie otwartym jest spadek dna

$$i_o = \Delta z/L,$$

gdzie Δz jest obniżeniem rzędnej dna rzeki na odcinku o długości L . Wielkość Δz możemy przeliczyć na stratę energii na jednostkę objętości cieczy, gdyż zgodnie z symboliką klasycznego równania Bernoulliego (g – przyspieszenie ziemskie)

$$\Delta E = \rho g \Delta z.$$

Korzystając teraz ze wzoru Manninga [134] mamy

$$\Delta E = \rho g \frac{v^2 n^2 L}{R_H^{2/3}},$$

gdzie: v – prędkość średnia w rzece, n – współczynnik szorstkości według Manninga, R_H – promień hydrauliczny.

Energia ta ulega przemianie w energię ciepłą, toteż zgodnie z równaniem kalorycznym (4.143) możemy napisać, że

$$\Delta E = \rho \Delta e = \rho C_w \Delta T,$$

gdzie: C_w – ciepło właściwe cieczy, T – przyrost temperatury wody, spowodowany przemianą energii mechanicznej w ciepłą.

Łącząc dwie ostatnie relacje, możemy następująco wyrazić przyrost temperatury wody na jednostkę długości rzeki (przy założeniu, że nawet część energii cieplnej nie przenosi się przez powierzchnię dna i brzegów oraz przez swobodną powierzchnię wody):

$$\frac{\Delta T}{L} = \frac{g v^2 n^2}{C_w R_H^{4/3}}.$$

Dla warunków rzecznych możemy przyjąć [134], że $v = 2,0$ m/s, $n = 0,032$ i $R_H = 2,0$ m, zaś dla wody $C_w = 4200$ m²/(s² K). Oznacza to, że wskutek straty energii mechanicznej możemy spodziewać się przyrostu temperatury rzędu

$$\Delta T/L = 4 \cdot 10^{-6} \text{ K/m.} \quad \blacksquare$$

Jak widać z oszacowania, otrzymanego w ramach przykładu 4.1, przyrost temperatury wynikający ze strat energii mechanicznej, w warunkach typowych dla przepływu wód rzecznych, jest znikomo mały. Możemy więc pierwsze dwa człony prawej strony równania (4.74) pominąć.

Ten sam wniosek dotyczy czwartego członu prawej strony tego równania. Aby to wykazać, wprowadźmy maksymalną wartość prędkości względnej

$$\mathbf{u}_m^* = \max(\mathbf{u}_i^*), \quad (4.75)$$

co pozwoli napisać, że ($\mathbf{u}_m^* = \text{const}$)

$$\text{div} \left(\sum_{i=0}^{I_m} [P_i] \mathbf{u}_i^* \right) \leq \mathbf{u}_m^* \text{div} \left(\sum_{i=0}^{I_m} [P_i] \right) = \mathbf{u}_m^* \text{div}[P] \ll \mathbf{u}_b \text{div}[P] \quad (4.76)$$

bowiem prędkość względna (czyli zgodnie z (4.13) prędkość dyfuzji)

$$\mathbf{u}_i^* \ll \mathbf{u}_b, \quad (4.77)$$

co będzie wykazane w podrozdz. 4.8.

Ostatnia relacja pozwala nam również odrzucić ostatni człon w równaniu (4.47). Opisuje on strumień pędu poszczególnych składników mieszaniny, związany z ich ruchem względnym. Wobec (4.77) człon ten jest znikomo mały w porównaniu z członem adwekcyjnym (drugie wyrażenie po lewej stronie (4.47)), co upoważnia nas także do odrzucenia pokrewnego członu w równaniu zachowania energii mieszaniny (piąty człon po prawej stronie (4.74)), jak też następnego członu tego równania, opisującego przenoszenie kinetycznej energii składnika z jego prędkością względną [69].

Nie możemy natomiast z góry pominąć ostatniego członu równania (4.74), gdyż ma on charakter jakościowo różny od przedostatniego. Zauważmy bowiem, że o ile człon przedostatni będzie nieskończenie małą trzeciego rzędu w płynie znajdującym się w stanie bezruchu (gdy $\mathbf{u}_i = \mathbf{u}_i^*$), to człon ostatni jest niezależny od ruchu makroskopowego.

Zwróćmy też uwagę, że skoro zgodnie z (4.13) iloczyn stężenia i prędkości względnej określa mikroskopowy (dyfuzyjny) ruch masy substancji rozpuszczonej, to

$$\mathbf{q}_{di} = c_i \mathbf{e}_i \mathbf{u}_i^* \quad (4.78)$$

jest jednostkowym strumieniem energii wewnętrznej i -tego składnika mieszaniny, wywołanym mikroskopowym ruchem jego molekuł. Suma członów typu (4.78) określa całkowity jednostkowy strumień względny energii wewnętrznej mieszaniny

$$\mathbf{q}_d = \sum_{i=0}^{I_m} c_i \mathbf{e}_i \mathbf{u}_i^*. \quad (4.79)$$

Ostatecznie więc, po wykorzystaniu wszystkich omówionych w tym paragrafie uproszczeń, otrzymujemy zestaw następujących równań zachowania:

— masy i -tego składnika mieszaniny ($i = 0, 1, \dots, I_m$)

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \text{div}(c_i \mathbf{u}_b) = -\text{div} \mathbf{m}_{di} + \sum_{j=1}^{I_r} Z_{ij}, \quad (4.80)$$

— masy mieszaniny

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}_b) = 0, \quad (4.81)$$

— pędu mieszaniny

$$\rho \frac{D\mathbf{u}_b}{Dt} = \rho \mathbf{f}_z + \operatorname{div}[\mathbf{P}], \quad (4.82)$$

— energii mieszaniny

$$\rho \frac{De}{Dt} = -\operatorname{div} \mathbf{q}_d + \rho q_e. \quad (4.83)$$

Zestaw ten obejmuje $(I_m + 6)$ relacji skalarnych, w których występuje $(4I_m + 18)$ skalarnych niewiadomych – $(I_m + 1)$ stężeń c_i , $(3I_m + 3)$ składowych wektorów \mathbf{m}_{di} , po trzy składowe wektorów \mathbf{u}_b oraz \mathbf{q}_d , gęstość mieszaniny ρ , jej energia wewnętrzna e oraz sześć niezależnych składowych tensora $[\mathbf{P}]$. Tak więc do zamknięcia układu brakuje nam $(3I_m + 12)$ relacji skalarnych. Funkcje źródłowe (z_{ij} dla przemian masy oraz q_e dla energii cieplnej) nie mają charakteru niewiadomych. Są określone przez chemiczny skład rozważanej mieszaniny i mogą być wyrażone przez już zdefiniowane zmienne oraz odpowiednie stałe (podrozdz. 4.10).

W stosunku do stanu wyjściowego (przedstawionego na początku tego paragrafu) dokonaliśmy znacznej redukcji, zarówno liczby niewiadomych, jak i liczby równań. Odbłyło się to jednak kosztem wprowadzenia pewnych założeń upraszczających, a więc kosztem pewnego obniżenia dokładności opisu interesujących nas zjawisk. Mimo to układ równań zachowania z formalnego punktu widzenia nadal należy uważać za skomplikowany. Tym samym nieuniknione będą dalsze jego uproszczenia. Jednakże przed ich rozważeniem zajmujemy się ostatecznym zamknięciem tego układu.

4.4. Równania konstytutywne

4.4.1. Uwagi ogólne

Wprowadzone w podrozdz. 4.3 równania zachowania są prawdziwe dla każdej materii. Jednakże nawet w wyniku codziennych obserwacji otaczającego nas świata stwierdzamy, że różne substancje w różny sposób reagują na takie same wymuszenia. Przykładowo, kamień uderzony młotkiem stawia opór, wydaje słyszalny dźwięk i powoduje odbicie młotka, nawet jeśli sam pęknie. Natomiast woda, w której swobodną powierzchnię spróbujemy takim młotkiem „uderzyć”, nie stawia wyczuwalnego oporu i co najwyżej „rozchlapie się” z cichym pluskiem. Prawa fizyczne, które pozwalają opisać te zróżnicowane reakcje nazywamy *prawami konstytutywnymi*, zaś wyrażające je równania fizyki matematycznej – *równaniami konstytutywnymi*.

Odgrywają one ogromną rolę w naukach przyrodniczych i technicznych. Część z nich ma bardzo szeroki zakres ważności, czyli dotyczy obszernych klas substancji i procesów. Ale są też równania o ograniczonym zakresie ważności. Niekiedy (szczególnie podczas wstępnego badania nowych, nietypowych materiałów, jak na przykład materiały złożone, zwane kompozytami) są one czysto empirycznymi relacjami, opisującymi obserwowane procesy, które dopiero w trakcie dokładnych prac wzbogacane są refleksją teoretyczną.

Niezależnie od swej konkretnej formy, równania konstytutywne podlegają pewnym ogólnym zasadom. Znajomość tych zasad ułatwia zarówno zrozumienie sensu już istniejących równań, jak też konstruowanie nowych. Warto więc pamiętać o trzech najważniejszych zasadach [86, 172].

W pierwszym rzędzie wymienić trzeba *warunek jednorodności wymiarowej* (który zresztą dotyczy wszystkich równań fizyki matematycznej). Mówi on, że po wstawieniu do równania wymiarów wszystkich występujących w nim wielkości fizycznych (w przyjętym układzie jednostek), wymiary po obu stronach równania muszą być identyczne.

Kolejna zasada mówi, że stan ciała w każdej chwili jest uzależniony od jego stanów w przeszłości (*postulat przyczynowości* lub *determinizmu*). Innymi słowy, zachowanie się substancji nie może zależeć od jej stanów przyszłych, czyli materia nie może mieć zdolności prognostycznych. Jednocześnie działa *zasada zanikającej pamięci*, zgodnie z którą wpływ stanów przeszłych na stan ciała słabnie z upływem czasu. Oznacza to, że największy wpływ na stan aktualny mają stany bezpośrednio go poprzedzające, czyli realna „pamięć” układu jest ograniczona.

I wreszcie *postulat obiektywności* mówi, że zachowanie się ciała nie może zależeć od ruchu obserwatora (czyli od wyboru układu współrzędnych).

Równania konstytutywne wiążą ze sobą *zmiennie konstytutywne*. W interesujących nas tu zagadnieniach rozważać będziemy następujące *zmiennie konstytutywne zależne*:

- wektor jednostkowego strumienia masy i -tego składnika mieszaniny \mathbf{m}_{di} ;
- wektor jednostkowego strumienia ciepła \mathbf{q}_d ;
- tensor naprężenia $[P]$;
- gęstość rozkładu energii wewnętrznej e .

Będą one funkcjami następujących *zmiennych konstytutywnych niezależnych*:

- stężenia i -tego składnika mieszaniny c_i ;
- tensora prędkości deformacji $[D]$;
- temperatury mieszaniny T ,

które z kolei będą się zmieniały w przestrzeni i w czasie.

4.4.2. Prawo Ficka

4.4.2.1. Treść prawa i jego interpretacja. Prawo Ficka wiąże ze sobą jednostkowy strumień masy substancji, wywołany przez chaotyczny ruch jej molekuł, oraz gęstość rozkładu masy tej substancji (czyli jej stężenie). Zjawisko to nazywamy *dyfuzją molekularną* (gdyż odbywa się ono na poziomie elementarnym).

Jak każde prawo konstytutywne, także prawo Ficka można przedstawić dwojako – albo jako empiryczne twierdzenie, będące uogólnieniem wyników licznych obserwacji, albo jako rezultat rozumowania teoretycznego. Podajmy najpierw jego pierwszą wersję, traktując to drugie ujęcie jako podstawę do opisowej interpretacji mechanizmu dyfuzji molekularnej.

Prawo Ficka w swej podstawowej wersji (patrz pkt 4.4.2.4) można sformułować następująco:

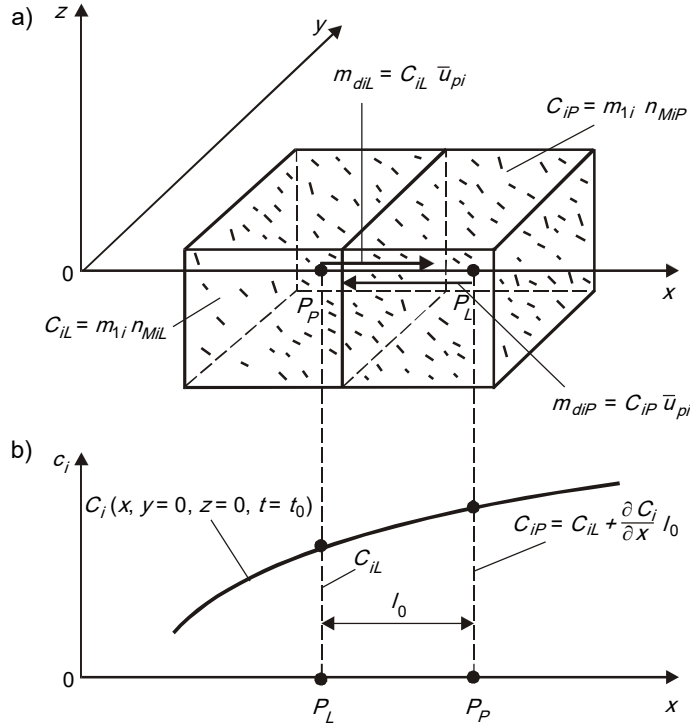
Jednostkowy względny strumień masy każdego z „i” składników roztworu (mieszaniny molekularnej) jest liniową, jednorodną i izotropową funkcją gradientu gęstości rozkładu masy tego składnika,

oraz zapisać w postaci równania

$$\mathbf{m}_{di} = -D_{Mi} \text{grad } c_i. \quad (4.84)$$

Występujący w powyższej formule termin „liniowy” oznacza, że funkcja „grad c_i ” występuje w równaniu (4.84) w pierwszej potędze, termin „jednorodny” – że równanie to

nie zawiera członu stałego, zaś termin „izotropowy” – że w trakcie dyfuzji nie występują żadne uprzywilejowane kierunki, różnicujące własności ośrodka i przebieg procesu. Konsekwencją tego ostatniego warunku jest skalarny charakter mnożnika D_{Mi} , występującego w (4.84). Przeciwnościem pojęcia *izotropii* jest pojęcie *anizotropii* [120, 170].



Rys. 4.3. Mechanizm dyfuzji molekularnej

Symbol D_{Mi} oznacza współczynnik dyfuzji molekularnej. Omówiony zostanie on w punkcie następnym, lecz uprzednio przedstawimy istotę procesu dyfuzji w skali elementarnej. W tym celu wyobraźmy sobie dwa małe, przylegające do siebie, sześciąny o boku l_0 , będące otoczeniami leżących na osi $0x$ punktów P_L i P_P (rys. 4.3a). Niech w otoczeniu punktu P_L stężenie i -tej substancji wynosi $c_{iL} = c_i(x_L, y = 0, z = 0)$, zaś w punkcie P_P niech będzie

$$c_{iP} = c_{iL} + \frac{\partial c}{\partial x} l_0. \quad (4.85)$$

Chaotyczny ruch molekuł z prędkością $\bar{\mathbf{u}}_p$ odbywa się we wszystkich kierunkach. W rozważanym tu przykładowo kierunku osi $0x$ od punktu P_L do punktu P_P przemieszcza się więc strumień molekuł i -tej substancji, równy

$$m_{diL} = m_{\lambda i} n_{iL} \bar{\mathbf{u}}_{pi} = c_{iL} \bar{\mathbf{u}}_{pi}, \quad (4.86)$$

zaś w przeciwną stronę, od punktu P_P do punktu P_L , strumień

$$m_{diP} = m_{\lambda i} n_{iL} \bar{\mathbf{u}}_{pi} = c_{iP} \bar{\mathbf{u}}_{pi}. \quad (4.87)$$

Różnica tych wielkości określa strumień wypadkowy (efektywny)

$$m_{dix} = (c_{iL} - c_{iP})\bar{u}_{Pi} = \left[c_{iL} - \left(c_{iL} + \frac{\partial c_i}{\partial X} l_0 \right) \right] \bar{u}_{Pi} = -l_0 \frac{\partial c_i}{\partial X} \bar{u}_{Pi} \quad (4.88)$$

Jak widać, ten efektywny strumień masy zorientowany jest od punktu, w którym stężenie jest wyższe, do punktu o stężeniu niższym. Ostatnia relacja zawiera dwa typy wielkości – makroskopowe (składową strumienia \mathbf{m}_{di} w kierunku osi $0x$ i stężenie c_i) oraz mikroskopowe (moduł średniej prędkości chaotycznego ruchu molekuł u_{Pi} oraz dystans l_0 , który ze względu na charakter ruchu molekularnego musi być równy średniej drodze swobodnej molekuly, omówionej w par. 2.1.3 i 2.1.4).

Powtarzając powyższe rozumowanie dla kierunków $0y$ i $0z$, otrzymamy następujące relacje:

$$m_{diy} = -l_0 \bar{u}_{Pi} \frac{\partial c_i}{\partial y}, \quad (4.89)$$

$$m_{diz} = -l_0 \bar{u}_{Pi} \frac{\partial c_i}{\partial z}, \quad (4.90)$$

które łącznie z (4.88) możemy zapisać wektorowo

$$\mathbf{m}_{di} = -l_0 \bar{u}_{Pi} \text{grad } c_i. \quad (4.91)$$

4.4.2.2. Współczynnik dyfuzji molekularnej dla substancji rozpuszczonej. Porównując (4.84) i (4.91) stwierdzamy, że występujący w matematycznej wersji prawa Ficka współczynnik dyfuzji molekularnej D_{Mi} określony jest przez dwie wielkości, odnoszące się do skali elementarnej, czyli mamy

$$D_{Mi} \sim l_0 \bar{u}_{Pi}. \quad (4.92)$$

Jest to informacja bardzo istotna pod względem jakościowym. Pozwala ona na zrozumienie fizycznego sensu tego współczynnika, a także na skonstruowanie modeli procesów pokrewnych procesowi dyfuzji molekularnej (patrz par. 6.2.3), jednakże nie daje możliwości ścisłego wyznaczenia konkretnych wartości D_{Mi} dla różnych substancji.

Wynika to ze stosunkowo niskiej dokładności opisu molekularnej struktury materii (patrz rozdz. 2). Względnie dobre wyniki relacja (4.92) daje wtedy, gdy molekuly wszystkich składników mieszaniny można uznać za jednakowe, zaś sama mieszanina jest gazem. Stan taki jest osiągalny doświadczalnie wtedy, gdy badamy substancję jednorodną, której część molekuł została promieniotwórczo „zaznaczona”. Mieszanie takich „oznakowanych” molekuł z pozostałymi nosi wtedy nazwę samodyfuzji. Przykładowo, dla czystego wodoru współczynnik samodyfuzji obliczony z (4.92) wynosi (wartości \bar{u}_{Pi} oraz l_0 wzięto z tablicy 1)

$$D_{MS}^{\text{obl}} = 1,89 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s},$$

podczas gdy zgodnie z pomiarami [10] w takim przypadku mamy

$$D_{MS}^{\text{exp}} = 1,26 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}.$$

Z teoretycznego punktu widzenia oba rezultaty są zbliżone, co dobrze świadczy o zgodności zaproponowanego wyżej modelu zjawiska z rzeczywistością. Jednak dla potrzeb praktyki

rozbieżność między tymi wartościami jest zbyt duża (tym bardziej, że dotyczy dość prostego przypadku samodyfuzji, który nie ma znaczenia w problemach ekologicznych).

Dla szczególnie nas interesujących ciekłych mieszanin wieloskładnikowych dokładność obliczeń jest dużo gorsza, wobec czego *w praktyce współczynnik dyfuzji molekularnej traktujemy jako wielkość o charakterze empirycznym*. Przykładowe wartości tego współczynnika dla gazów podano w tabeli 5, zaś dla niektórych roztworów wodnych – w tabeli 6 i 7.

Współczynnik dyfuzji molekularnej dla mieszanin gazowych zależy od temperatury, co można opisać półempirycznym wzorem [10]

$$D_M(T = T_1) = D_M(T = T_2) \left(\frac{T_1}{T_2} \right)^{1,8}, \quad (4.93)$$

oraz od ciśnienia, którą to zależność dla umiarkowanych ciśnień (nieprzekraczających kilku tysięcy hektopaskali, co w pełni odpowiada warunkom naturalnego środowiska człowieka) wyraża się prostym prawem stałości iloczynu współczynnika i ciśnienia

$$D_M(p = p_1) p_1 = D_M(p = p_2) p_2. \quad (4.94)$$

Ponadto współczynnik ten dla gazów w pewnym stopniu zależy od stężenia składnika, lecz ten czynnik w praktyce możemy pominać (korekta nie przekracza kilku procent).

Wyraźnie inny charakter ma współczynnik dyfuzji dla roztworów ciekłych. Przede wszystkim jest on przeciętnie kilkadziesiąt tysięcy razy mniejszy od odpowiedniej wielkości dla gazów (co wynika z różnic w molekularnej strukturze obu tych stanów skupienia materii). Jego wartość wyraźnie zależy od stężenia roztworu (co widać w tabeli 6), przy czym często ze wzrostem stężenia obserwuje się najpierw szybki spadek D_M , a następnie – powolny wzrost. Relacja ta komplikuje się dla roztworów wieloskładnikowych (które powszechnie występują w zagadnieniach ekologicznych), jednakże brak jest kompletnej teorii, dającej możliwość uwzględnienia wpływu obecności innych składników roztworu na współczynnik dyfuzji molekularnej jednego z nich.

Dobrze natomiast rozpoznany jest wpływ temperatury na wartość D_M . Można tu stosować następujący wzór [10]:

$$D_M(T = T_1) = D_M(T = 20^\circ \text{C}) [1 + \alpha_D (T_1 - 20)], \quad (4.95)$$

gdzie:

$$\alpha_D = 0,002 \mu^{1/2} \rho^{-1/3}. \quad (4.96)$$

W ostatniej relacji dynamiczny współczynnik lepkości rozpuszczalnika μ (w temperaturze 20°C) należy wstawić w (g/cm s), zaś gęstość rozpuszczalnika ρ – w (g/cm³).

Wpływ ciśnienia na przebieg dyfuzji w roztworach ciekłych możemy w zagadnieniach inżynierii środowiska pominać, gdyż uwidacznia się on dopiero przy bardzo wysokich ciśnieniach (kilkadziesiąt razy wyższych od ciśnienia atmosferycznego).

W literaturze zagadnienia (na przykład [10]) znaleźć można metody teoretycznego wyznaczania współczynnika dyfuzji molekularnej oraz korygowania jego wartości, w sposób pozwalający na uwzględnienie pewnych czynników zewnętrznych. Jednakże nie będziemy ich bliżej rozważać, gdyż w interesujących nas tu zagadnieniach wpływ dyfuzji molekularnej uwzględniany jest rzadko (patrz rozdz. 8). Ma ona natomiast ogromne znaczenie poznawcze oraz metodyczne (z wyprowadzonych powyżej relacji będziemy korzystali przy badaniu pewnych zjawisk analogicznych – patrz par. 6.2.3).

Omówione wyżej metody wyznaczania D_M nie dotyczą względnego transportu masy rozpuszczalnika ($i = 0$), gdyż jest on uwarunkowany przez inne istotne czynniki (patrz podrozdz. 4.6).

4.4.2.3. Współczynnik dyfuzji molekularnej dla zawiesin. Omawiana w rozdz. 4 metoda fenomenologiczna niejako z definicji opisuje *migrację* (lub zamiennie: *przenoszenie*, *transport*) substancji rozpuszczonych (czyli rozproszonych do poziomu molekularnego). Molekuły tych substancji, płynąc z prędkością barycentryczną \mathbf{u}_b , jednocześnie poruszają się chaotycznym ruchem względnym, czego efektem jest ich przemieszczenie dyfuzyjne, opisane prawem Ficka (4.84).

Pod względem formalnym nic jednak nie stoi na przeszkodzie, aby tę metodę zastosować także do opisu migracji niektórych zawiesin. Co prawda same cząstki zawiesiny (w prędkości których można wyróżnić jako osobną składową prędkość barycentryczną \mathbf{u}_b , tak jak uczyniliśmy to dla molekuł substancji rozpuszczonych) nie wykonują ruchu chaotycznego, jednak są one nieustannie uderzane przez molekuły płynu rozpraszającego.

Dla większych cząstek liczba takich jednoczesnych uderzeń jest na tyle duża, że ich wypadkowa siła jest praktycznie równa zero. Jednakże w przypadku cząstek mniejszych chwilowy rozkład uderzeń przez molekuły jest nierównomierny, skutkiem czego każda z tych cząstek przemieszcza się po specyficznym torze, mającym kształt linii łamanej. Przemieszczenie to nazywane jest *ruchem Browna*. Może ono być bez trudu zarejestrowane (na przykład podczas mikroskopowej obserwacji pyłków kwiatowych, umieszczonych na swobodnej powierzchni wody).

Wobec powyższego możemy spodziewać się, że drobne cząstki zawiesiny (a więc cząstki koloidalne) będą również ulegały dyfuzji stężeniowej, opisanej prawem Ficka, przy czym intensywność ich dyfuzji powinna być dużo mniejsza niż w przypadku substancji rozpuszczonych.

Problem ten badany był m.in. przez Alberta Einsteina oraz (niezależnie) przez polskiego fizyka, Mariana Smoluchowskiego [148], dzięki czemu powstał następujący wzór, pozwalający na obliczenie *współczynnika dyfuzji dla zawiesiny*:

$$D_{MZ} = \frac{K_B T}{3\pi\mu d_c}, \quad (4.97)$$

gdzie: K_B – stała Boltzmanna (wzór (2.5)), T – temperatura bezwzględna, μ – lepkość ośrodka rozpraszającego, d_c – średnica cząstki zawiesiny.

Zauważmy, że w temperaturze 20°C współczynnik dyfuzji molekularnej wodnych zawiesin koloidalnych (gdy $d_c = 10^{-9} - 10^{-6}$ m) leży w granicach ($0,428 \cdot 10^{-12} - 0,428 \cdot 10^{-9}$ m²/s). Dla dużego rozdrobnienia (gdy cząstki koloidów są niewiele większe od molekuł roztworów) współczynnik ten jest bliski współczynnikowi dyfuzji dla substancji rozpuszczonych (patrz tablica 6), lecz dla cząstek większych szybko maleje, osiągając wartości około 1000 razy mniejsze przy granicy między koloidami a zawiesiną makroskopową.

4.4.2.4. Termodyfuzja. Formułując prawo Ficka, podkreśliliśmy, że równanie (4.84) odnosi się do podstawowej wersji tego prawa. W ujęciu dokładnym musimy uwzględnić nie tylko zróżnicowanie stężenia substancji rozpuszczonej, ale także ewentualne zróżnicowanie temperatury i ciśnienia roztworu oraz możliwość występowania pola sił zewnętrznych, indukujących dodatkowy ruch molekuł substancji rozpuszczonej. Czynniki te wywołują (obok omó-

wionej już dyfuzji stężeniowej) odpowiednio *dyfuzję cieplną (termodyfuzję)*, *ciśnieniową* oraz *wymuszoną*. Łącznie procesy tego typu określamy mianem *przepływów sprzężonych*.

Przy rozważaniu problemów migracji zanieczyszczeń prawie wyłącznie interesuje nas dyfuzja stężeniowa. Z pozostałych strumieni sprzężonych możemy jeszcze co najwyżej mieć do czynienia z *termodyfuzją*, wobec czego podamy tu uogólnioną wersję prawa Ficka, uwzględniającą dyfuzję cieplną. Mówi ono, że

$$\mathbf{m}_{di} = -D_{Mi} \text{grad } c_i - D_{MTi} \frac{1}{T} \text{grad } T. \quad (4.98)$$

Symbol D_{MTi} oznacza *współczynnik termodyfuzji*.

4.4.3. Prawo Fouriera

4.4.3.1. Sformułowanie i interpretacja prawa. W poprzednim punkcie omówiono molekularny transport masy substancji rozproszonej, spowodowany chaotycznym ruchem molekuł układu złożonego. Obecnie zajmujemy się molekularnym transportem energii cieplnej. Proces ten, podobnie jak dyfuzja molekularna, ma również charakter przepływu sprzężonego. Jednostkowy strumień względny energii cieplnej \mathbf{q}_d (równ. (4.79)) jest uwarunkowany zróżnicowaniem pól temperatury, stężenia i ciśnienia oraz ewentualnym działaniem sił zewnętrznych. Jednakże wszystkie te czynniki w pełni ujawniają się dość rzadko (jeśli już, to w procesach przemysłowych). Przy rozważaniu kwestii typu ekologicznego interesuje nas prawie wyłącznie zależność tego strumienia od pola temperatury, którą określa klasyczna wersja *prawa Fouriera*. Wpływ trzech pozostałych czynników, określane mianem *efektu Dufoura* [146], będziemy tu pomijali.

Przydatna dla nas podstawowa wersja prawa Fouriera może być sformułowana następująco:

Jednostkowy względny strumień energii cieplnej w ośrodku ciągłym jest liniową, jednorodną i izotropową funkcją gradientu temperatury,

czyli

$$\mathbf{q}_d = -\lambda \text{grad } T. \quad (4.99)$$

Symbol λ oznacza *współczynnik molekularnego przewodzenia ciepła*.

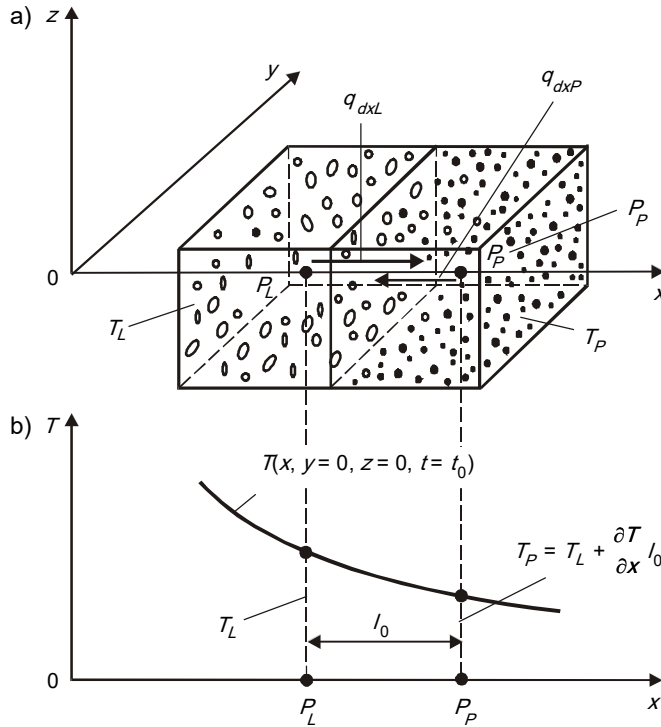
Dla zobrazowania mechanizmu procesu molekularnego przenoszenia ciepła przyjmijmy schemat analogiczny do już wykorzystanego podczas omawiania dyfuzji molekularnej (rys. 4.3), z tą jednak różnicą, iż tym razem różnicujemy nie zagęszczenie molekuł w otoczeniach punktów P_L i P_P , lecz energię ich drgań cieplnych (na rys. 4.4 symbolizują to różnice średnice kółeczek, oznaczających molekuły).

Rozważmy chaotyczną wymianę molekuł w kierunku osi $0x$, między sześciennymi objętościami, zaznaczonymi na rys. 4.4a. Wobec zmienności kinetycznej energii ruchu chaotycznego, wzdłuż tego kierunku przemieszczać się będzie strumień

$$q_{dxL} \cong n_M \bar{u}_P \frac{m_A \bar{u}_P^2}{2}, \quad (4.100)$$

a w przeciwną stronę towarzyszyć mu będzie strumień (patrz (4.103))

$$q_{dxP} \cong n_M \bar{u}_P \left[\frac{m_1 \bar{u}_P^2}{2} + \Delta \left(\frac{m_1 \bar{u}_P^2}{2} \right) \right]. \quad (4.101)$$



Rys. 4.4. Mechanizm molekularnego przewodzenia ciepła

Strumień efektywny (netto)

$$q_{dx} = q_{dxL} - q_{dxP} \cong -n_M \bar{u}_P \Delta \left(\frac{m_1 \bar{u}_P^2}{2} \right) \quad (4.102)$$

można wyrazić przez temperaturę płynu, korzystając z relacji (2.8) oraz rozwijając przyrost energii w (4.102) w szereg Taylora

$$\Delta \left(\frac{m_1 \bar{u}_P^2}{2} \right) = l_0 \frac{\partial (m_1 \bar{u}_P^2 / 2)}{\partial x}. \quad (4.103)$$

Pozwala nam to napisać, że

$$q_{dx} \approx -l_0 n_M \bar{u}_P k \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (4.104)$$

Powtarzając powyższe rozumowanie dla pozostałych dwóch osi, mamy

$$q_{dy} \approx -l_0 n_M \bar{u}_p k \frac{\partial T}{\partial y}, \quad (4.105)$$

$$q_{dz} \approx -l_0 n_M \bar{u}_p k \frac{\partial T}{\partial z}. \quad (4.106)$$

Wprowadzając makroskopową wielkość fizyczną

$$\lambda \approx l_0 n_M \bar{u}_p k, \quad (4.107)$$

otrzymamy znów relację (4.99), tym razem nie jako aprioryczne prawo o charakterze empirycznym, lecz jako wynik rozumowania teoretycznego, w którym przedstawiono zjawisko na poziomie molekularnym.

4.4.3.2. Współczynnik molekularnego przewodzenia ciepła. Zależność (4.107) opisuje wewnętrzną strukturę współczynnika λ , podobnie jak zależność (4.91) opisywała strukturę współczynnika dyfuzji molekularnej. I podobnie jak poprzednio, również w tym przypadku w praktyce λ traktujemy jako współczynnik empiryczny, którego wartość dla konkretnych substancji odczytujemy z tablic. W zagadnieniach ekologicznych najczęściej potrzebować będziemy wartości współczynników molekularnego przewodzenia ciepła dla wody, powietrza i niekiedy dla gruntu. W temperaturze 273 K (0°C) wynoszą one:

$$\lambda_0^{\text{powietrze}} = 0,0237 \text{ (kg m)/(s}^3\text{K)};$$

$$\lambda_0^{\text{woda}} = 0,4800 \text{ (kg m)/(s}^3\text{K)};$$

$$\lambda_0^{\text{grunt}} = 1,05 \text{ (kg m/s}^3\text{K)}.$$

Współczynniki te w pewnym stopniu uzależnione są od temperatury. Dla powietrza możemy dla określenia tego wpływu stosować wzór Sutherlanda, zgodnie z którym

$$\lambda^{\text{powietrze}}(T) = \lambda_0^{\text{powietrze}} \frac{398}{T+125} \left(\frac{T}{273} \right)^{3/2}, \quad (4.108)$$

natomiast dla wody użyteczny jest następujący wzór empiryczny:

$$\lambda^{\text{woda}}(T) = \lambda_0^{\text{woda}} [1 + 0,001 (T - 273)]. \quad (4.109)$$

W zakresie umiarkowanych ciśnień (a więc także przy interesującym nas ciśnieniu atmosferycznym) przewodnictwo cieplne gazów i cieczy nie zależy od tego czynnika.

Trzecim (obok temperatury i ciśnienia) czynnikiem, którego wpływ na przewodnictwo cieplne może nas interesować, jest obecność substancji rozproszonych. Efekt ten nie jest jeszcze dostatecznie zbadany. Na ogół przewodnictwo cieplne mieszanin (gazowych i ciekłych) nie jest wielkością addytywną, toteż nie może być obliczane przez proporcjonalne do stężenia sumowanie udziałów poszczególnych składników. Na szczęście w zagadnieniach ekologicznych jednoczesne prognozowanie procesu migracji zanieczyszczeń materialnych oraz energii cieplnej nie jest zadaniem powszechnym (gdyż z reguły rozważamy tylko jeden z tych procesów). W razie pojawienia się takiej potrzeby, sposobu wyznaczania efektywnej wartości (przynajmniej w przybliżeniu) należy poszukiwać w literaturze specjalistycznej (np. [10]).

4.4.4. Prawo Newtona

4.4.4.1. Pojęcie naprężenia. Obok już omówionego molekularnego transportu masy substancji rozproszonej i energii cieplnej, chaotyczny ruch cząsteczek wywołuje także względny strumień pędu (lub ilości ruchu). Jednakże ze względów praktycznych nie posługujemy się tym strumieniem, lecz równoważnym mu funkcjonalnie pojęciem naprężenia (siły powierzchniowej, odniesionej do jednostki powierzchni S , na którą ta siła działa)

$$\mathbf{p}_n = \lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{F}_S}{\Delta S}. \quad (4.110)$$

Zgodnie z przyjętą w mechanice ośrodków ciągłych konwencją (np. [101]), naprężenie \mathbf{p}_n wyrażamy jako iloczyn tensora naprężenia $[P]$ oraz wektora jednostkowego \mathbf{n} , normalnego do powierzchni S

$$\mathbf{p}_n = [P] \mathbf{n}. \quad (4.111)$$

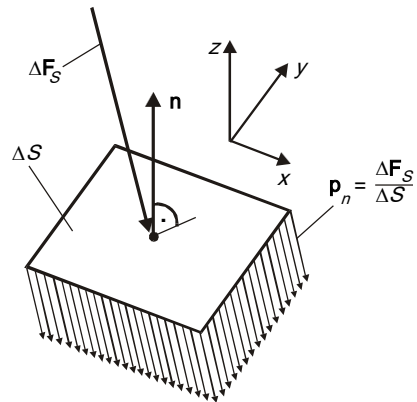
Interpretację dwóch ostatnich relacji pokazano na rys. 4.5.

W par. 4.2.4 posługiwaliśmy się pojęciem tensora naprężenia dla całej mieszaniny $[P]$ oraz tensora naprężenia dla każdego z jej składników $[P_i]$. Związek między nimi określa relacja (4.43). Pozwala ona na przedstawienie naprężenia \mathbf{p}_n jako sumy naprężeń \mathbf{p}_{ni} , z których każde wywołane jest przez inny składnik, gdyż

$$\mathbf{p}_n = \sum_{i=0}^I \mathbf{p}_{ni}. \quad (4.112)$$

Zauważyliśmy jednocześnie, że wielkości $[P_i]$ oraz \mathbf{p}_{ni} mają charakter co najwyżej postulatyczny, gdyż nie istnieje możliwość selektywnego pomiaru ich wartości. Możemy jedynie mierzyć naprężenie łączne w całej mieszaninie \mathbf{p}_n .

Wobec powyższego staraliśmy się wyeliminować z rozważań tensory $[P_i]$. Było to możliwe dzięki pominięciu równań zachowania pędu (4.39) dla składników mieszaniny, gdyż ich uwzględnianie nie wносиło istotnych informacji o ruchu mieszaniny, oraz dzięki odrzuceniu pomijalnie małych członów dyssypacyjnych w równaniu (4.67). W dalszym ciągu nie będziemy więc rozważać równań konstytutywnych, określających molekularny transport pędu poszczególnych składników mieszaniny, a ograniczymy się do sformułowania prawa Newtona dla mieszaniny jako całości.



Rys. 4.5. Związek między siłą powierzchniową \mathbf{F}_S a naprężeniem \mathbf{p}_n

4.4.4.2. Równanie konstytutywne i jego interpretacja. Prawo Newtona dla mieszaniny jest identyczne z odpowiednim prawem dla płynu jednorodnego. Mówi ono, że

Tensor naprężenia w płynie niejednorodnym $[P]$ jest liniową, niejednorodną i izotropową funkcją tensora prędkości deformacji $[D]$,

co można następująco wyrazić w zapisie symbolicznym:

$$[\mathbf{P}] = a [\mathbf{E}] + b [\mathbf{D}], \quad (4.113)$$

gdzie: a i b są współczynnikami skalarnymi, $[\mathbf{E}]$ – tensorem jednostkowym

$$[\mathbf{E}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (4.114)$$

zaś tensor prędkości deformacji $[\mathbf{D}]$ definiujemy zgodnie z klasyczną kinematyką ośrodków ciągłych [101]

$$[\mathbf{D}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_x}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) & \frac{\partial u_y}{\partial y} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) & \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{bmatrix}. \quad (4.115)$$

Występujące w (4.113a) ogólne mnożniki a i b wyznaczamy, korzystając z formalnego wymogu równości śladów obu stron równania (4.113), czyli pisząc, że

$$\text{tr}([\mathbf{P}]) = \text{tr}(a[\mathbf{E}] + b[\mathbf{D}]), \quad (4.116)$$

skąd

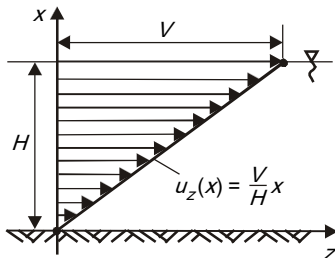
$$p_{xx} + p_{yy} + p_{zz} = 3a + b \text{ div } \mathbf{u}. \quad (4.117)$$

Ze względu na obserwowaną w rzeczywistości oraz popartą rozważaniami teoretycznymi [101] równość trzech naprężeń normalnych (p_{xx} , p_{yy} oraz p_{zz}), możemy napisać (patrz relacja 2.22), że

$$p_{xx} + p_{yy} + p_{zz} = -3p. \quad (4.118)$$

Tak zdefiniowaną wielkość fizyczną p nazywamy *ciśnieniem*.

Dруга informacja, wykorzystywana przy wyznaczaniu stałych a i b , ma charakter empiryczny. Pomiary naprężenia stycznego oraz pola prędkości dla prostych przepływów (na przykład dla przepływu ścinającego lub przepływu Couette'a, dla którego profil prędkości pokazano na rys. 4.6) pozwalają stwierdzić, że



$$p_{xz} = \mu \frac{\partial u_z}{\partial x}, \quad (4.119)$$

gdzie współczynnik proporcjonalności μ nazywamy *dynamicznym współczynnikiem lepkości molekularnej*. Wykorzystując trzy ostatnie relacje, otrzymamy

$$a = - \left(p + \frac{2}{3} \mu \text{ div } \mathbf{u} \right), \quad (4.120)$$

$$b = 2\mu, \quad (4.121)$$

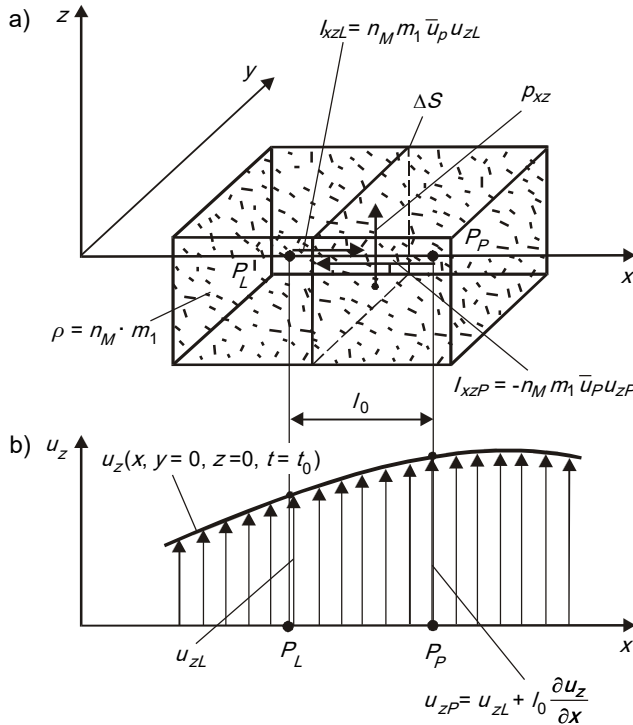
Rys. 4.6. Pole prędkości dla przepływu Couette'a

co pozwala następująco zapisać równanie konstytutywne

Newtona dla mieszaniny:

$$[P] = -\left(p + \frac{2}{3}\mu \operatorname{div} \mathbf{u}\right) [E] + 2\mu [D]. \quad (4.122)$$

Relacja ta może być również uzyskana w drodze analizy procesów molekularnej wymiany pędu. Punktem wyjścia do jej przeprowadzenia jest schemat na rys. 4.7.



Rys. 4.7. Mechanizm molekularnej wymiany pędu

Wskutek chaotycznego ruchu molekuł ze średnią prędkością \bar{u}_p przez powierzchnię ΔS przepływać będzie jednostkowy strumień pędu (a ściślej – jego składowa I_{xz} , związana z chaotycznym ruchem molekuł w kierunku osi $0x$, przy czym rozważamy teraz składową prędkości średniej tych molekuł w kierunku osi $0z$), skierowany od punktu P_L do punktu P_P

$$I_{xzL} \approx n_M m_1 \bar{u}_p u_{zL}, \quad (4.123)$$

oraz jednoczesny strumień jednostkowy I_{xzP} , skierowany przeciwnie (rys. 4.7a)

$$I_{xzP} \approx -n_M m_1 \bar{u}_p u_{zP}. \quad (4.124)$$

Efektywny jednostkowy strumień pędu jest równy

$$\Delta I_{xz} \approx n_M m_1 \bar{u}_p (u_{zL} - u_{zP}) = -n_M m_1 \bar{u}_p l_0 \frac{\partial u_z}{\partial x}. \quad (4.125)$$

Zgodnie z ideą II prawa Newtona (4.113), ten efektywny strumień pędu zastępowany jest przez pojęcie naprężenia, w tym przypadku $-p_{xz}$, czyli

$$p_{xz} \approx n_M m_1 \bar{u} \rho l_0 \frac{\partial u_z}{\partial x}. \quad (4.126)$$

Porównując ostatnią relację z (4.119) widzimy, że obie one będą identyczne, jeżeli przyjmiemy, że dynamiczny współczynnik lepkości μ (wielkość makroskopowa) da się wyrazić jako następujący iloczyn trzech wielkości, określonych w skali elementarnej:

$$\mu \approx n_M m_1 \bar{u} \rho l_0. \quad (4.127)$$

Pamiętając, że według (2.24)

$$n_M m_1 \approx \rho, \quad (4.128)$$

możemy zdefiniować także *kinematyczny współczynnik lepkości molekularnej*:

$$v \approx \bar{u} \rho l_0, \quad (4.129)$$

przy czym

$$\mu = \rho v. \quad (4.130)$$

Powtarzając powyższe rozumowanie dla pozostałych kombinacji trzech kierunków chaotycznego przenoszenia molekuł oraz towarzyszących im trzech kierunków ruchu makroskopowego, otrzymamy interpretację wszystkich dziewięciu skalarnych składowych tensorowej relacji (4.122), określających wpływ wyrażonej tensorem [D] zmienności pola prędkości płynu na stan naprężenia. Sens fizyczny pozostałych składników, tworzących pierwszy człon po prawej stronie (4.122), wyjaśnia klasyczna mechanika płynów.

Mianowicie, zgodnie z molekularną interpretacją ciśnienia p , jest ono miarą intensywności uderzeń molekuł o ściany naczynia (lub o inną powierzchnię, na którą działa ciśnienie). Z kolei w kinematyce ośrodków ciągłych [101] dowodzi się, że dywergencja pola prędkości jest miarą zmiany objętości substancji ($\text{div } \mathbf{u} > 0$ – ekspansja, $\text{div } \mathbf{u} < 0$ – kompresja). Oznacza to, że występujące w (4.122) wyrażenie

$$\frac{2}{3} \mu \text{div } \mathbf{u}$$

określa dodatkowe naprężenie normalne do powierzchni, będące konsekwencją zmiany objętości płynu w czasie ruchu.

Ostatecznie możemy więc powiedzieć, że stan naprężenia w płynie newtonowskim określony jest przez sześć parami równych naprężeń stycznych ($i, j = x, y, z, i \neq j$)

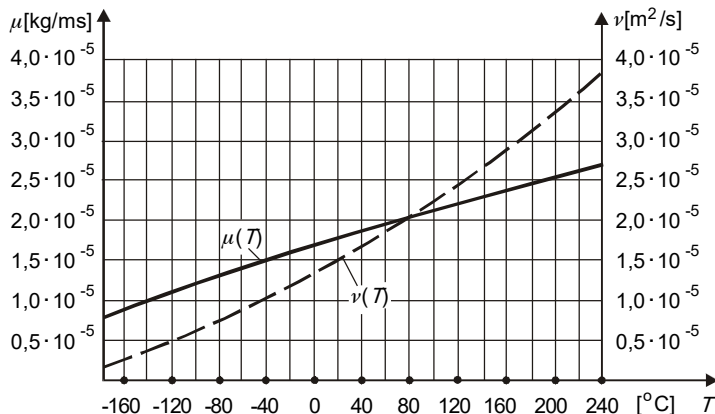
$$p_{ij} = p_{ji} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (4.131)$$

oraz trzy naprężenia normalne ($i = x, y, z$)

$$p_{ii} = -p - \frac{2}{3} \mu \text{div } \mathbf{u} + 2 \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_i}. \quad (4.132)$$

4.4.4.3. Współczynnik lepkości roztworu. Relacje (4.127) oraz (4.129) ukazują związek makroskopowego współczynnika wymiany pędu z molekularną charakterystyką płynu. Porównując (4.129) i (4.92) widzimy, że teoretyczna wartość kinematycznego współczynnika

lepkości molekularnej powinna być identyczna z wartością współczynnika dyfuzji molekularnej, przy czym (jak już stwierdziliśmy w punkcie 4.4.2.2) dokładność określenia parametrów molekuł jest na tyle ograniczona, że w praktyce oba współczynniki (ν oraz D_M) traktujemy jako stałe materiałowe, wyznaczone na drodze empirycznej i najczęściej tablicowane.



Rys. 4.8. Współczynnik lepkości powietrza w funkcji temperatury (pod ciśnieniem atmosferycznym) [10]

Z czystych płynów interesuje nas woda i powietrze. Wartości obu współczynników lepkości (dynamicznego μ oraz kinematycznego ν) dla tych substancji, pod ciśnieniem atmosferycznym, podano na rys. 4.8 (powietrze) i rys. 4.9 (woda). Jak widać, zależą one od temperatury, przy czym lepkość powietrza (jak i pozostałych gazów) rośnie ze wzrostem temperatury, podczas gdy dla wody (oraz innych cieczy) mamy inną sytuację – jej lepkość maleje w miarę podwyższania temperatury. Do celów obliczeniowych można stosować następujące wzory [10]:

— dla wody (wzór Thorpego i Rodgera)

$$\mu_w(T) = \frac{\mu_{wo}}{1 + 0,0337(T - 273) + 0,000221(T - 273)^2}, \quad (4.133)$$

— dla powietrza (wzór Sutherlanda)

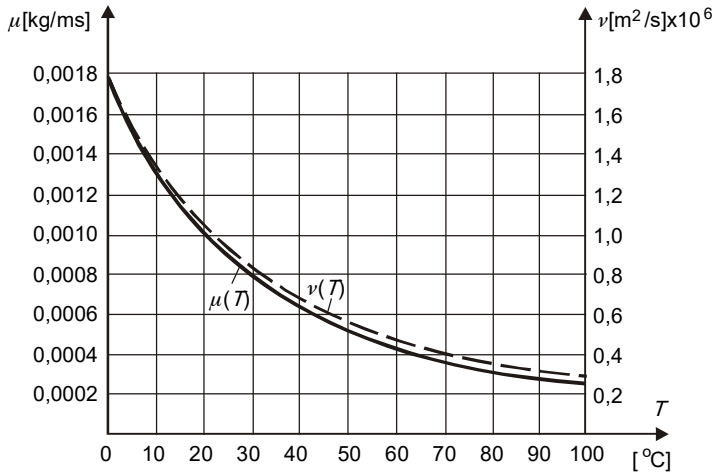
$$\mu_p(T) = \mu_{Po} \frac{385}{(T + 112)} \left(\frac{T}{273} \right)^{3/2}, \quad (4.134)$$

w których T – temperatura w stopniach Kelvina.

Lepkości bazowe wynoszą (dla temperatury $T = 273$ K)

$$\mu_{wo} = 0,00179 \text{ kg/(ms)}, \quad \mu_{Po} = 0,0000168 \text{ kg/(ms)}. \quad (4.135)$$

Omawiane współczynniki, zarówno dla gazów, jak i dla cieczy, wzrastają wraz z ciśnieniem. Jednakże wzrost ten ujawnia się dopiero przy bardzo znacznych wartościach tego czynnika (przynajmniej kilkadziesiąt razy przekraczających wartość ciśnienia atmosferycznego), toteż w praktyce możemy go pominąć.



Rys. 4.9. Współczynnik lepkości wody w funkcji temperatury (pod ciśnieniem atmosferycznym) [10]

Bardziej skomplikowana jest kwestia wyznaczania współczynnika lepkości dla mieszanin i roztworów. W przypadku mieszanin gazowych współczynnik ten nie jest wielkością addytywną, czyli współczynniki lepkości czystych składników nie sumują się proporcjonalnie do ich stężenia. Dla mieszanin wieloskładnikowych można polecić wzór Wilkego, zgodnie z którym dynamiczny współczynnik lepkości takiej mieszaniny wynosi [10]

$$\mu = \sum_{i=0}^{I_m} \frac{\mu_i}{1 + \frac{1}{x_i} \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{I_m} x_j A_{ij}}, \quad (4.136)$$

gdzie: I_m – liczba rozproszonych składników mieszaniny ($i = 0$ oznacza składnik główny; dla nas będzie nim powietrze), μ_i – dynamiczny współczynnik lepkości czystego składnika o indeksie „ i ”, x_i, x_j – ułamki molowe składników i oraz j , A_{ij} – funkcje pomocnicze, zależne od stosunku współczynników lepkości (μ_i/μ_j) oraz od stosunku ich ciężarów cząsteczkowych (M_i/M_j); można je obliczyć ze wzoru

$$A_{ij} = \frac{[1 + (\mu_i/\mu_j)^{1/2} (M_j/M_i)^{1,4}]^2}{2,83[1 + M_i/M_j]^{1/2}}. \quad (4.137)$$

Obliczenia według metody Wilkego są dokładne, lecz dość uciążliwe. Do celów technicznych można stosować mniej dokładny (błąd sięga tu 4%), lecz dogodny wzór empiryczny Heringa i Zipperera

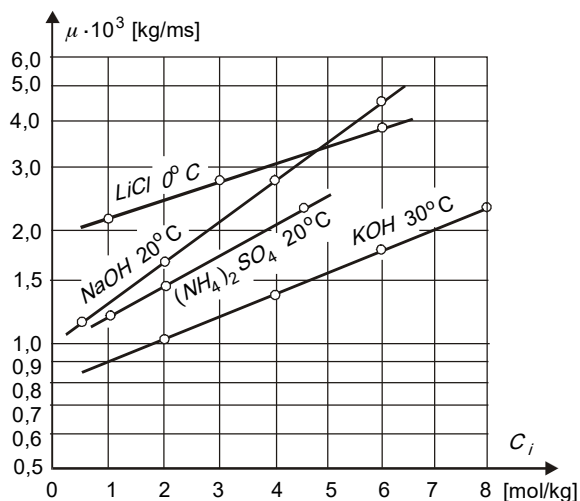
$$\mu = \frac{\sum_{i=0}^{I_m} x_i \mu_i \sqrt{M_i T_{ci}}}{\sum_{i=0}^{I_m} x_i \sqrt{M_i T_{ci}}}, \quad (4.138)$$

gdzie T_{ci} – temperatura krytyczna i -tego składnika mieszaniny w stopniach Kelwina, zaś pozostałe symbole – jak we wzorze (4.136). Wartości $\sqrt{MT_c}$ dla niektórych gazów podano w tabeli 8.

Dużo trudniej, niż dla gazów, jest określić współczynnik lepkości roztworów i mieszanin ciekłych. Nie istnieje zamknięta teoria, pozwalająca na wyznaczenie tego współczynnika na drodze rachunkowej, nawet dla niezbyt złożonych mieszanin.

Jak wynika z pomiarów, lepkość roztworu wodnego wzrasta ze stężeniem, albo też zmienia się w sposób nieregularny (wykazując minimum, na przykład dla wodnych roztworów niektórych soli amonowych, lub wykazując maksimum, na przykład dla mieszaniny wody z kwasem octowym). Tym samym nie można sformułować ogólnej zależności, przydatnej do obliczeń.

Tak więc, jeżeli mamy podstawy, by sądzić, że obecność substancji rozpuszczonych może w istotny sposób wpłynąć na lepkość interesującego nas roztworu, należy indywidualnie opracować dla niego relację $\mu(c_i)$, korzystając z literatury specjalistycznej (na przykład [10]) lub przeprowadzając stosowne pomiary. Dla elektrolitów pożyteczna może być tak zwana siatka Davisa. Otrzymuje się ją, zaznaczając na osi pionowej stężenie roztworu (w molach na jeden kilogram wody), zaś na osi poziomej – logarytm dziesiętny z sinusów lepkości tego roztworu, pomnożonych przez dziesięć (czyli wartość $\log \sin(10 \mu)$). Pożytek z takiego układu współrzędnych wynika z faktu, że dla bardzo wielu elektrolitów odpowiedni wykres ma kształt linii prostej (wobec czego do jego wyznaczenia potrzebne są tylko dwa punkty pomiarowe, czyli dwie wartości współczynnika lepkości, zmierzone dwa dwóch różnych stężeniach). Przykładową siatkę Davisa pokazano na rys. 4.10.



Rys. 4.10. Siatka Davisa dla wodnych roztworów niektórych elektrolitów

Współczynniki lepkości dla niektórych roztworów wodnych podano w tablicy 9. Z kolei dla mieszanin ciekłych nie wykazujących asocjacji mamy wzór Arrheniusa

$$\log \mu = \sum_{i=0}^{I_m} (x_i \log \mu_i). \quad (4.139)$$

4.4.4.4. Współczynnik lepkości zawiesiny. Podobnie jak to miało miejsce dla przypadku dyfuzji molekularnej (pkt 4.4.2.3), także pojęcie lepkości można zdefiniować dla zawiesin (układów niejednorodnych), traktowanych jako ośrodki ciągłe (czyli w ramach omawianej w tym rozdziale metody fenomenologicznej).

Za podstawowy uznać należy wzór *Einsteina*, zgodnie z którym lepkość zawiesiny, utworzonej z kropelek cieczy lub pęcherzyków gazu o lepkości μ_P , rozproszonych w płynie o lepkości μ_n , jest równa

$$\mu = \mu_n \left[1 + c_V \frac{\mu_n + 2,5\mu_P}{\mu_n + \mu_P} \right]. \quad (4.140)$$

Wzór ten jest ważny dla stężeń objętościowych zawiesiny $c_V \leq 40\%$. Dla zawiesiny utworzonej z kulistych cząstek ciała stałego (czyli gdy $\mu_P \rightarrow \infty$), ze wzoru (4.140) otrzymuje się pożyteczną relację

$$\mu = \mu_n(1 + 2,5 c_V). \quad (4.141)$$

4.4.5. Równanie kaloryczne

W paragrafie 4.2.6 zdefiniowaliśmy całkowitą energię kinetyczną dla każdego ze składników mieszaniny jako sumę jej energii, wyznaczonej dla ruchu makroskopowego, oraz jej energii wewnętrznej e (równ. (4.53)).

Energia wewnętrzna jest ściśle związana z ilością ciepła pobranego (lub oddanego) przez jednostkę masy substancji podczas zmiany jej temperatury o ΔT . Odpowiedni współczynnik proporcjonalności w relacji, opisującej tę prawidłowość, nazywamy *ciepłem właściwym* i definiujemy następująco:

$$C_w = \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \frac{\Delta e}{\Delta T}. \quad (4.142)$$

Przy ustalonej zmianie temperatury ilość ciepła jest uzależniona od rodzaju zachodzącej przemiany, toteż wyróżniamy:

- ciepło właściwe izobaryczne C_{wp} (przy stałym ciśnieniu),
- ciepło właściwe izochoryczne C_{ww} (w stałej objętości).

Różnice między tymi wielkościami dla cieczy i ciał stałych są pomijalnie małe, toteż korzystając z (4.142), możemy dla nich napisać, że

$$de = C_w dT. \quad (4.143)$$

Po scałkowaniu powyższego od temperatury początkowej T_0 do dowolnej temperatury T , otrzymamy następujące *równanie kaloryczne* dla cieczy:

$$e = C_w T + e_0. \quad (4.144)$$

Inaczej jest dla gazów. Różnica

$$C_{wp} - C_{ww} = R = 8,3144 \text{ J/(mol K)} \quad (4.145)$$

jest znaczna (i równa *stałej gazowej* R), a *równanie kaloryczne* ma tu postać całkową

$$e = \int_{T_0}^T C_{ww}(T) dT \quad (4.146)$$

(dla przemiany izochorycznej).

Ciepło właściwe jest współczynnikiem o charakterze stałej materiałowej. Dla interesujących nas tu substancji w stanie czystym mamy (dla temperatury 20°):

$$\begin{aligned} C_w^{\text{woda}} &= 4181,1 \text{ J/(kg K)}, \\ C_{wp}^{\text{powietrze}} &= 1004,9 \text{ J/(kg K)}, \quad C_{ww}^{\text{powietrze}} = 716,5 \text{ J/(kg K)}, \\ C_w^{\text{grunt}} &= 840 \text{ J/(kgK)}. \end{aligned} \quad (4.147)$$

Wpływ temperatury i ciśnienia na ciepło właściwe substancji w ważnym dla nas zakresie wartości możemy pominąć, natomiast uwzględnić musimy wpływ obecności substancji rozproszonych w płynie nośnym. Jest to względnie proste, gdyż ciepło właściwe ma charakter addytywny, czyli

$$C_w = \sum C_{Mi} C_{wi}. \quad (4.148)$$

Wartości ciepła właściwego dla niektórych płynów podano w tabeli 10.

4.4.6. Bilans równań konstytutywnych

Zestawmy liczbę informacji, zawartych w omówionych w podrozdz. 4.4 prawach konstytutywnych. Jak wynika z naszych rozważań, umożliwiają one napisanie następujących równań:

- $3I_m$ skalarnych relacji, wynikających z prawa Ficka (4.84), dla każdej z substancji rozproszonych (ale nie dla rozpuszczalnika – patrz podrozdz. 4.6),
- 3 skalarnie relacje, opisane prawem Fouriera (4.99) dla mieszaniny,
- 6 skalarnych relacji, danych prawem Newtona (4.122) dla mieszaniny,
- 1 skalarnie równanie kaloryczne dla mieszaniny, postaci (4.144) lub (4.146).

Łączna liczba skalarnych relacji konstytutywnych wynosi więc

$$3I_m + 10.$$

Jednocześnie równania te wprowadzają do rozważań dwie nowe wielkości fizyczne:

- ciśnienie p ,
- temperaturę T .

Co prawda w drobiazgowym ujęciu do niewiadomych zaliczyć można także występujące w tych równaniach współczynniki materiałowe (współczynniki dyfuzji, przewodnictwa cieplnego i lepkości oraz ciepło właściwe), lecz dla każdej z tych wielkości podaliśmy odpowiednią relację, wyrażającą jej aktualną wartość (o ile zmienia się ona w trakcie przebiegu procesu) przez pewną wartość podstawową (najczęściej odniesioną do warunków normalnych) oraz przez człon korekcyjny (opisujący jej zależność od temperatury, ciśnienia i od stężenia substancji rozpuszczonych). Tym samym nie musimy współczynników tych traktować jako zmienne.

Uwzględniając (przy powyższych zastrzeżeniach) zestawienie podane na końcu podrozdz. 4.3, możemy stwierdzić, że całkowita liczba dotychczas wyprowadzonych równań wynosi

$$4I_m + 21,$$

a zawierają one

$$4I_m + 17$$

niewiadomych. Do zamknięcia układu brakuje nam więc czterech relacji skalarnych. Pierwszą z nich stanowi *równanie stanu*, które omówimy w następnym podrozdziale.

4.5. Równanie stanu

4.5.1. Uwagi wstępne

Mianem równania stanu tradycyjnie określa się związek między wielkościami opisującymi stan równowagi układu termodynamicznego. Należy podkreślić, że ogólne równanie stanu, ważne dla każdej substancji, nie istnieje (to znaczy, nie zostało dotychczas sformułowane).

Stosunkowo najlepiej rozwinięta jest ta teoria dla gazów. Znane jest klasyczne *równanie stanu gazu doskonałego* (2.13). Zachowanie się jednorodnych gazów rzeczywistych bardzo dokładnie można opisać za pomocą *równania Kammerlingha-Onnesa*

$$\frac{pV_m}{RT} = 1 + \frac{B_{WT}}{V_m} + \frac{C_{WT}}{V_m^2} + \frac{D_{WT}}{V_m^3} + \dots, \quad (4.149)$$

gdzie: V_m – objętość molowa gazu, B_{WT} , C_{WT} , D_{WT} – odpowiednio drugi, trzeci i czwarty współczynnik wirialu [10].

Równorzędną propozycję stanowi tu *równanie Van der Waalsa*

$$\left(p + \frac{a}{V_m^2} \right) (V_m - b) = RT, \quad (4.150)$$

gdzie: a i b – stałe, charakteryzujące poszczególne gazy.

Dla cieczy, ze względu na ich bardziej skomplikowaną budowę molekularną, sytuacja jest trudniejsza. Na szczęście w sytuacjach praktycznie ważnych w technice bardzo wiele zagadnień można rozwiązać przy założeniu, że gęstość płynu jest stała

$$\rho = \text{const}. \quad (4.151)$$

Ta najprostsza postać równania stanu bywa niekiedy stosowana także dla gazów (wtedy, gdy zmienność gęstości gazu nie powoduje istotnych efektów; najczęściej efekty takie związane są z przepływem substancji, indukowanym przez różnicę jej gęstości, czyli z *ruchem konwekcyjnym*). W zakresie dopuszczalności relacji (4.151) możemy dla ustalonej temperatury T (°C) i ciśnienia p (mm Hg) stosować następujące wzory empiryczne:

— woda w temperaturze 0 – 40°C

$$\rho^{\text{woda}} = 1000 - \frac{(T-4)^2}{503,57} \frac{T+273}{T+67,2} \quad (\text{kg/m}^3), \quad (4.152)$$

— woda w temperaturze 25 – 100°C

$$\rho^{\text{woda}} = 1000 - \frac{(T-4)^2}{466,7} \frac{T+273}{T+67} \quad (\text{kg/m}^3), \quad (4.153)$$

— powietrze

$$\rho^{\text{powietrze}} = 1,225 \frac{p}{760} \frac{288}{273+T} \quad (\text{kg/m}^3). \quad (4.154)$$

Do naszych celów musimy jednak w pierwszej kolejności umieć uwzględnić w równaniu stanu obecność substancji rozpuszczonych.

4.5.2. Wyprowadzenie równania stanu dla cieczy niejednorodnej

4.5.2.1. Kontrakcja. Punktem wyjścia będzie dla nas stwierdzenie o addytywności mas składników mieszaniny ciekłej (równ. (2.25)). Nawet jeśli składniki te reagują między sobą, to w każdej chwili czasu łączna masa ΔM próbki mieszaniny jest sumą mas jej składników ΔM_i

$$\Delta M = \sum_{i=0}^{I_m} \Delta M_i. \quad (4.155)$$

Oznaczmy przez ΔV objętość tej próbki. Graniczną wartość ilorazu masy mieszaniny przez jej objętość nazwalimy gęstością tej mieszaniny, zaś w przypadku poszczególnych składników mówimy o stężeniu (par. 2.2.6). Możemy więc napisać, że

$$\frac{dM}{dV} = \rho = \sum_{i=0}^{I_m} \frac{dM_i}{dV} = \sum_{i=0}^{I_m} c_i = c_0 + \sum_{i=1}^{I_m} c_i. \quad (4.156)$$

Iloraz masy rozpuszczalnika i objętości próbki określa gęstość aktualnego rozkładu masy rozpuszczalnika i może być nazwany „stężeniem rozpuszczalnika w roztworze” c_0 . Wielkość tę wyodrębniono w ostatniej relacji, gdyż ma to duże znaczenie dla dalszych rozważań.

Należy podkreślić, że prawo addytywności nie obowiązuje dla objętości próbki (nie jest ona równa sumie objętości poszczególnych składników, ani też w ogólnym przypadku nie jest równa objętości samego rozpuszczalnika)

$$dV \neq \sum_{i=0}^{I_m} dV_i, \quad dV \neq dV_0. \quad (4.157)$$

Stanowi to konsekwencję oddziaływania na poziomie elementarnym między molekułami substancji rozpuszczonych oraz molekułami rozpuszczalnika, które łącznie określamy mianem *elektrostrykcji*. Oddziaływania te powodują, że zależnie od budowy chemicznej substancji rozpuszczonych, molekuły rozpuszczalnika są od siebie „odpychane” lub też „przyciągane”. Efektem tego jest zmiana objętości roztworu w stosunku do sumy objętości jego składników, co nosi nazwę *kontrakcji roztworu*.

Od strony ilościowej opis kontrakcji jest trudny i nie do końca zbadany. W praktyce definiuje się *cząstkowe objętości właściwe* ΔV_{di} , określające przyrost (gdy $\Delta V_{di} > 0$) lub spadek (gdy $\Delta V_{di} < 0$) początkowej objętości rozpuszczalnika, wynikające z rozpuszczania w nim jednostki masy i -tej substancji. Wielkość ta w przypadku substancji ulegających dysocjacji elektrolitycznej wyznaczana jest dla poszczególnych jonów (przykłady – tabela 11).

Cząstkowe objętości właściwe zależą od temperatury (przy czym zależność ta jest nieliniowa) oraz od stężenia roztworu. Przykładowo [27], jeżeli pomieszcymy 500 ml wodnego roztworu Na_2SO_4 o stężeniu 2,0 mol/dm³ z takim samym roztworem $MgSO_4$, to łączna objętość powstałego roztworu dwuskładnikowego wyniesie 1000,3 ml (nastąpi przyrost objętości o 0,3 ml). Gdy natomiast stężenie roztworu $MgSO_4$ wyniesie 1,0 mol/dm³, to objętość mieszaniny wyniesie 999,0 ml (nastąpi spadek objętości łącznej o 1,0 ml). Zauważmy, że opisane powyżej zmiany objętości mają charakter dodatkowy,

gdyż pierwsza część procesu kontrakcji musiała nastąpić wcześniej, podczas przygotowywania roztworów roboczych.

W dalszym ciągu pominiemy zależność ΔV_{di} od stężenia roztworu, gdyż interesują nas raczej umiarkowane poziomy tych stężeń (dla których istniejące relacje empiryczne [79] pozwalają zaakceptować to założenie). Możemy wtedy następująco wyrazić zmianę objętości próbki roztworu (w stosunku do objętości zawartego w niej czystego rozpuszczalnika):

$$\Delta V - \Delta V_0 = \sum_{i=1}^{I_{me}} \Delta V_{di} \Delta M_i. \quad (4.158)$$

Występujące w (4.156) „stężenie rozpuszczalnika w roztworze” wynosi więc

$$c_0 = \frac{\Delta M_0}{\Delta V} = \frac{\Delta M_0}{\Delta V_0} \cdot \frac{\Delta V_0}{\Delta V} = \rho_0 \frac{\Delta V_0}{\Delta V}. \quad (4.159)$$

Wykorzystując (4.158), możemy napisać, że

$$\frac{\Delta V_0}{\Delta V} = \frac{1}{\Delta V} \left(\Delta V - \sum_{i=1}^{I_{me}} \Delta V_{di} \Delta M_i \right) = 1 - \sum_{i=1}^{I_{me}} \Delta V_{di} c_i. \quad (4.160)$$

Podstawiając dwie ostatnie relacje do (4.156) widzimy, że gęstość roztworu jest równa

$$\rho = \rho'_0 \left(1 - \sum_{i=1}^{I_{me}} \Delta V_{di} c_i \right) + \sum_{i=1}^{I_m} c_i. \quad (4.161)$$

Indeks „prim” przy gęstości rozpuszczalnika oznacza, że odnosi się ona do ustalonej temperatury i ciśnienia, których ewentualną zmienność także należy wziąć pod uwagę. Podkreślimy, że I_{me} oznacza liczbę składników rozpuszczonych, z uwzględnieniem ewentualnej dysocjacji, toteż $I_{me} \geq I_m$.

4.5.2.2. Rozszerzalność cieplna cieczy. W interesującym nas zakresie zmienności temperatury możemy (zamiast nieliniowych relacji empirycznych (4.152) lub (4.153)) przyjąć, że pod jej wpływem następuje liniowa zmiana objętości cieczy, czyli

$$\frac{\Delta V_0}{V_0} = \beta \Delta T. \quad (4.162)$$

Mnożnik β nazywamy *współczynnikiem rozszerzalności cieplnej*. Dla wody w temperaturze od 0°C do 100°C możemy przyjąć, że

$$\beta = 0,00021 \text{ (1/K)}. \quad (4.163)$$

Korzystając z (4.162), możemy następująco wyrazić zależność gęstości cieczy od temperatury:

$$\rho'_0(T) = \rho_0 [1 - \beta(T - T_0)], \quad (4.164)$$

gdzie ρ_0 jest gęstością tej cieczy w temperaturze odniesienia T_0 .

4.5.2.3. Ściślność cieczy. Ściślność jest własnością cieczy, która przejawia się w zmianie jej objętości wraz ze zmianą ciśnienia. W dość szerokim zakresie zmienności ciśnienia możemy przyjąć, że zależność ta jest liniowa i że zachodzi

$$\frac{\Delta V_0}{V_0} = -\frac{\Delta p}{E_C}. \quad (4.165)$$

Symbol E_C oznacza *moduł sprężystości* cieczy. Dla wody w temperaturze 20°C, przy ciśnieniu do 5,0 MPa można przyjąć, że

$$E_C = 0,215 \cdot 10^{10} \text{ (N/m}^2\text{)}. \quad (4.166)$$

Wobec powyższego możemy napisać, że

$$\rho'_0(p) = \rho_0[1 + (p - p_0)/E_C], \quad (4.167)$$

gdzie ρ_0 oznacza gęstość cieczy pod ciśnieniem p_0 .

4.5.2.4. Równanie stanu dla cieczy niejednorodnej. Powyżej omówiliśmy wpływ trzech głównych czynników (stężeń substancji rozpuszczonych, temperatury i ciśnienia) na gęstość cieczy niejednorodnej. Wyniki obserwacji w skali technicznej pozwalają na przyjęcie możliwości superponowania tych wpływów, wobec czego ostatecznie (łącząc (4.161), (4.164) oraz (4.167)) możemy przyjąć następującą postać *równania stanu dla roztworu*:

$$\rho(T, p, c_i) = \rho_0[1 - \beta(T - T_0)][1 + (p - p_0)/E_C] \left(1 - \sum_{i=1}^{I_{me}} \Delta V_{di} c_i \right) + \sum_{i=1}^{I_m} c_i. \quad (4.168)$$

Symbol ρ_0 oznacza tu gęstość czystego rozpuszczalnika w warunkach normalnych (w temperaturze T_0 i pod ciśnieniem p_0). W praktyce wartość tę odczytuje się z tablic (na przykład [81, 159]), toteż korzystając z tego typu źródeł informacji, należy sprawdzić, jakie wartości T_0 i p_0 zostały w nich przyjęte.

Należy też zwrócić uwagę na charakter tablic, z których odczytujemy wartości ΔV_{di} . Gdy odnoszą się one do substancji rozpuszczonych, wtedy granice sumowania w (4.168) są identyczne ($I_{me} = I_m$). Gdy jednak cząstkowe objętości właściwe wyznaczone są dla jonów, wtedy I_{me} oznacza liczbę jonów, zaś I_m – liczbę substancji rozpuszczonych.

Wyprowadzona powyżej postać równania stanu, choć i tak obarczona pewną liczbą założeń upraszczających (które omawialiśmy w miarę ich wprowadzania), jest dość kłopotliwa w obliczeniach. Z tego względu przed ich podjęciem każdorazowo warto zorientować się, czy w badanym przypadku konieczne jest uwzględnianie wszystkich czynników, mogących powodować zmiany gęstości roztworu.

Przykład 4.2

Oszacować wpływ temperatury, ciśnienia oraz stężenia substancji rozpuszczonej na gęstość wody, dla warunków występujących w naturalnym środowisku człowieka.

Rozwiązanie

W temperaturze poniżej 0°C woda zamarza, toteż jako interesujący nas zakres zmienności temperatury przyjmijmy

$$T_{\min} = 4^\circ\text{C}, \quad T_{\max} = 30^\circ\text{C}.$$

Jako temperaturę odniesienia przyjmijmy $T_0 = 10^\circ\text{C}$, gdy pod ciśnieniem atmosferycznym

$$\rho_0 = 999,7 \text{ kg/m}^3.$$

Zgodnie z (4.164) mamy wtedy

$$\rho'_0(T = 4^\circ\text{C}, p = p_0) = 1000,0 \text{ kg/m}^3, \quad \rho'_0(T = 30^\circ\text{C}, p = p_0) = 995,5 \text{ kg/m}^3.$$

Zakres zmienności ciśnienia atmosferycznego (bo takie właśnie panuje w środowisku naturalnym) najlepiej będzie oszacować przy pomocy skali typowego barometru. Pozwala to przyjąć, że

$$p_0 = 1013 \text{ hPa}, p_{\min} = 940 \text{ hPa}, \quad p_{\max} = 1070 \text{ hPa}.$$

Korzystając z (4.167) oraz z obliczonych poprzednio wartości gęstości, mamy

$$\rho'_0(T = 4^\circ\text{C}, p = 1070 \text{ hPa}) = 1000,003 \text{ kg/m}^3,$$

$$\rho'_0(T = 30^\circ\text{C}, p = 940 \text{ hPa}) = 995,497 \text{ kg/m}^3.$$

Jak widać, spodziewane zmiany temperatury i ciśnienia mogą spowodować wahania gęstości (czystej wody) od spadku o 0,42%, do wzrostu o 0,03%. W kategoriach technicznych są to zmiany bardzo niewielkie.

Nieco trudniej jest oszacować zakres zmienności stężeń substancji rozpuszczonych, które mogą występować w naturze. Nawet względnie czyste wody powierzchniowe (rzeczne, jeziorne, morskie), nie mówiąc już o ściekach, zawierają bardzo wiele składników rozpuszczonych, choć ich stężenia są z reguły niskie, dalekie od stężeń nasycenia.

Wobec powyższego rozważmy wpływ kontrakcji na przykładzie wybranych składników, ale za to na poziomie nasycenia roztworu.

Maksymalna ilość chlorku sodu (NaCl), którą pod ciśnieniem atmosferycznym i w temperaturze 25°C można rozpuścić w 1000 ml wody destylowanej, wynosi

$$M_{n\text{NaCl}} = 0,358 \text{ kg},$$

przy czym masa jonów sodowych jest tu równa 0,140 kg, zaś jonów chlorkowych – 0,218 kg. Zgodnie z (4.160) możemy (korzystając z tabeli 10) obliczyć względną zmianę objętości rozpuszczalnika

$$\frac{\Delta V_0}{\Delta V} = 1,0 - 0,463 \cdot 0,218 + 0,152 \cdot 0,140 = 0,9204.$$

Tak więc skutek kontrakcji objętość nasyconego roztworu wodnego NaCl , otrzymanego z 1000 ml wody destylowanej, jest o niemal 9% większa od objętości rozpuszczalnika, gdyż

$$\Delta V = 1,0865 \Delta V_0.$$

„Stężenie rozpuszczalnika” w takim roztworze wyniesie więc ($M_0 = 0,997 \text{ kg}$, $\Delta V_0 = 1,0 \text{ dm}^3$)

$$C_0 = M_0/\Delta V = 0,997/1,0865 = 0,918 \text{ kg/dm}^3.$$

Podkreślimy, że wartość ta odnosi się do *samego rozpuszczalnika* i nie wolno jej mylić z gęstością całego roztworu, która w tym przypadku jest równa

$$\rho = (M_0 + M_{n\text{NaCl}})/\Delta V = (0,358 + 0,997)/1,0865 = 1,247 \text{ kg/dm}^3.$$

Rozważmy teraz nasycony roztwór bromku potasu. W jednym decymetrze sześciennym wody można rozpuścić 540 g tej soli (w tym 177 g jonów potasowych i 363 g jonów bromkowych). Względna zmiana objętości rozpuszczalnika wynosi teraz (patrz tabela 11)

$$\frac{\Delta V_0}{\Delta V} = 1,0 - 0,177 \cdot 0,184 - 0,363 \cdot 0,288 = 0,862.$$

Objętość roztworu wzrośnie więc o 16%, bo

$$\Delta V = 1,160 \Delta V_0,$$

zaś „stężenie rozpuszczalnika” jest równe

$$c_0 = 0,997/1,16 = 0,859 \text{ kg/dm}^3.$$

Jak widać, skutek kontrakcji gęstość samego rozpuszczalnika w rozważanych przypadkach spada od kilku do kilkunastu procent. Jednakże dotyczy to stanu nasycenia, z którym w zagadnieniach typu ekologicznego mamy bardzo rzadko do czynienia. W praktyce możemy więc spodziewać się, że zmiana gęstości rozpuszczalnika nie przekroczy 1% (uwzględniając tu także wpływ zmian temperatury i ciśnienia). ■

Powyższy przykład pozwala stwierdzić, że w zagadnieniach związanych z rozprzestrzenianiem się zanieczyszczeń zmiany gęstości samego rozpuszczalnika będą bardzo niewielkie. Tym samym powszechnie przyjmuje się założenie, że $\rho_0 = \text{const}$, co pozwala następująco zapisać uproszczoną postać równania stanu:

$$\rho = \rho_0 + \sum_{i=1}^{I_m} c_i. \quad (4.169)$$

4.6. Ruch względny rozpuszczalnika

Po wyprowadzeniu równania stanu oraz jego uproszczonej wersji (4.169), do zamknięcia bazowego układu równań brakuje nam trzech równań skalarnych (patrz par. 4.4.6). Jak wynika z dyskusji nad prawem Ficka (patrz ostatni akapit punktu 4.4.2.2), podstawy do wyprowadzenia tych równań musimy poszukiwać w analizie ruchu względnego molekuł rozpuszczalnika.

Ruch ten wywołany jest przez dwa typy czynników, każdy o odrębnym charakterze. Pierwszym z nich jest chaotyczny ruch drobin rozpuszczalnika, wywołujący makroskopowy strumień względny masy, opisany prawem Ficka (4.84), który w przypadku samego rozpuszczalnika nazywany jest *samodyfuzją*. Drugim z kolei czynnikiem są przemieszczenia drobin substancji rozpraszającej wskutek oddziaływań wywieranych przez drobiny substancji rozpuszczonych (*elektrostrykcja*), powodujące *kontrakcję*. Jak wynika z omówionej w punkcie 4.5.2.1 charakterystyki tego zjawiska, związany z kontrakcją ruch względny molekuł rozpuszczalnika *nie może być opisany relacją typu prawa Ficka*. Choć bowiem zjawisko to nie jest w pełni zbadane, to już bazując na będących w naszej dyspozycji danych, możemy zaproponować (przynajmniej teoretycznie) taki skład roztworu, w którym względny ruch molekuł rozpuszczalnika byłby zorientowany niezgodnie z kierunkiem gradientu stężenia.

Istnieją jednakże możliwości powiązania względnego strumienia masy rozpuszczalnika

$$\mathbf{m}_{d0} = c_0 \mathbf{u}_0^* \quad (4.170)$$

(patrz 4.13) z innymi wielkościami, występującymi w rozważanych równaniach. W tym celu podstawmy \mathbf{u}_i z (2.20) do (2.29). Po wykonaniu oczywistych przekształceń stwierdzimy, że

$$\sum_{i=0}^{I_m} \mathbf{m}_{di} = \sum_{i=0}^{I_m} c_i \mathbf{u}_i^* = 0, \quad (4.171)$$

co wobec (4.84) dla $i = 1, 2, \dots, I_m$ można przepisać następująco:

$$\mathbf{m}_{d0} = - \sum_{i=1}^{I_m} \mathbf{m}_{di} = \sum_{i=1}^{I_m} D_{Mi} \text{grad } c_i. \quad (4.172)$$

Jest to brakująca relacja wektorowa (równoważna trzem równaniami skalarnym), zamykająca ogólny układ równań metody fenomenologicznej. Jej postać potwierdza sformułowane na początku tego punktu zastrzeżenie jakościowe co do możliwości powiązania wektora \mathbf{m}_{d0} z wektorem (grad c_0), choć bowiem równanie konstytutywne (4.172) ma formę „gradientową”, to po jego lewej stronie występuje względny strumień rozpuszczalnika, zaś po prawej stronie – kombinacja stężeń wszystkich substancji rozpuszczonych (bez rozpuszczalnika).

Wykorzystując (4.168) i (4.170), możemy (4.171) przepisać w pomocniczej formie, ukazującej zależność prędkości względnej molekuł rozpuszczalnika \mathbf{u}_0^* od pozostałych zmiennych

$$\mathbf{u}_0^* = \frac{\sum_{i=1}^{I_m} D_{Mi} \text{grad } c_i}{\rho_0 [1 - \beta \Delta T] [1 + \Delta p / E_C] \left[1 - \sum_{i=1}^{I_m} \Delta V_{di} c_i \right]}. \quad (4.173)$$

4.7. Bazowy układ równań metody fenomenologicznej

Układem bazowym nazwalimy taki zamknięty zespół równań fizyki matematycznej, który zawiera minimalną (ze względu na zachowanie fizycznej interpretacji opisu formalnego) liczbę równań. Liczba ta jest tym większa, im wyższy jest wymagany stopień dokładności opisu badanego zjawiska.

W dotychczasowych rozważaniach przyjęliśmy już pewne założenia upraszczające, każdorazowo uzasadniając je w trakcie wprowadzania. Określony przez te założenia model ruchu płynu niejednorodnego jest jednak na tyle ogólny, że w praktyce może być traktowany jako narzędzie o wysokim poziomie dokładności (nawet po pominięciu zmian gęstości rozpuszczalnika, czego wyrazem jest zapis równania stanu w postaci (4.169)).

Ostateczną wersję bazowego układu równań dla takiego przypadku otrzymamy po podstawieniu do relacji (4.80) – (4.83) omówionych powyżej równań konstytutywnych oraz uwzględnieniu równania stanu (w wersji (4.169)). Po wykonaniu prostych przekształceń otrzymamy następujące zależności matematyczne:

— równanie zachowania masy dla i -tej substancji rozpuszczonej ($i = 1, 2, \dots, I_m$)

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \operatorname{div}(c_i \mathbf{u}_b) = \operatorname{div}(D_{Mi} \operatorname{grad} c_i) + Z_i, \quad (4.174)$$

— równanie zachowania masy roztworu

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}_b) = 0, \quad (4.175)$$

— równanie zachowania pędu roztworu

$$\rho \frac{D\mathbf{u}_b}{Dt} = \rho \mathbf{f}_z - \nabla \left(p + \frac{2}{3} \mu \operatorname{div} \mathbf{u}_b \right) + \operatorname{div}(2\mu[D]), \quad (4.176)$$

— równanie zachowania energii roztworu

$$\frac{DT}{Dt} = \operatorname{div}(D_w \operatorname{grad} T) + q_{es}, \quad (4.177)$$

— równanie stanu roztworu

$$\rho = \rho'_0(p, T) + \sum_{i=1}^{I_m} c_i. \quad (4.178)$$

Tensor prędkości deformacji $[D]$ w relacji (4.176) określa macierz (4.115), symbol

$$q_{es} = q_e / C_w \quad (4.179)$$

oznacza skorygowaną funkcję źródłową, opisującą intensywność wydzielania lub poboru energii cieplnej w trakcie reakcji (o ile zachodzą one w trakcie przepływu), zaś

$$D_w = \frac{\lambda}{\rho C_w} \quad (4.180)$$

jest wielkością pomocniczą, zwaną *współczynnikiem wyrównywania temperatury*.

W ten sposób otrzymaliśmy układ $(I_m + 6)$ równań skalarnych, zamknięty ze względu na $(I_m + 6)$ następujących niewiadomych skalarnych:

$$I_m \times c_i, \mathbf{u}_b, \rho, p, T.$$

Niewiadome te określiliśmy mianem *bazowych* (patrz par. 2.2.3), gdyż dopiero po ich wyznaczeniu możliwe jest obliczenie wartości pozostałych wielkości fizycznych, mogących mieć znaczenie podczas badania procesów migracji zanieczyszczeń materialnych i energii cieplnej.

W zestawionych powyżej równaniach zmiennymi mogą być także występujące w nich współczynniki transportu pędu, masy i energii (odpowiednio μ , D_{Mi} , D_w), ciepło właściwe C_w oraz gęstość czystego rozpuszczalnika ρ'_0 . Jednakże aktualne wartości każdego z tych współczynników potrafimy (dla większości przypadków przynajmniej z niezłym przybliżeniem) wyznaczyć z relacji, omawianych sukcesywnie w podrozdz. 4.4. Tym samym niecelowe byłoby traktowanie ich jako niewiadomych.

4.8. Praktyczne wersje układu bazowego

Rozwiązywanie zestawionego w poprzednim paragrafie bazowego układu równań jest zadaniem skomplikowanym. Pomimo już przyjętych podczas jego wyprowadzania założeń upraszczających, w dalszym ciągu stanowi on złożoną strukturę matematyczną, toteż w swej pełnej postaci stosowany jest przy badaniu takich zagadnień, w których wpływ obecności substancji rozproszonych oraz/lub zmian temperatury na ruch roztworu lub mieszaniny ma zasadnicze znaczenie. Typowym zadaniem może tu być konwekcyjny ruch płynu, wywołany różnicowaniem jego gęstości (na przykład cyrkulacja powietrza w zamkniętym pomieszczeniu, wyposażonym w grzejnik).

Często wszakże (szczególnie w zagadnieniach inżynierii i ochrony środowiska) występują takie sytuacje, że ruch płynu powodowany jest innymi czynnikami (siła ciężkości, praca pompy itd.), na tyle silnymi, że podczas wyznaczania pola prędkości można całkowicie pominąć wpływ fizycznej i chemicznej niejednorodności tego płynu. Można wtedy w istotnym stopniu uprościć układ bazowy.

Uproszczenie to polega na rozprzężeniu układu – „równania ruchu” (4.175) i (4.176) stają się niezależne od „równań transportu” (4.174) oraz/lub (4.177). Formalnie stan taki osiągamy przez założenie stałości współczynników występujących w tych równaniach (D_{M_i} , D_w oraz μ), oraz przyjęcie, że

$$\rho = \text{const.} \quad (4.181)$$

Wobec (4.178) widzimy, że możemy tu napotkać różne przypadki. Po pierwsze, suma stężeń substancji rozproszonych może być bardzo mała w porównaniu z gęstością rozpuszczalnika

$$\rho_0 \gg \sum_{i=1}^{I_m} c_i. \quad (4.182)$$

Z taką właśnie sytuacją będziemy z reguły mieli do czynienia w zagadnieniach typu ekologicznego, gdy stężenia substancji rozproszonych są niskie, dalekie od stężeń nasycenia, ale mimo to rozważamy migrację tych substancji, gdyż nawet przy niskim stężeniu są one szkodliwe. Możemy wtedy przyjąć następującą (prostą i wygodną) wersję równania stanu (4.181):

$$\rho = \rho_0. \quad (4.183)$$

O drugim typie sytuacji możemy mówić wtedy (głównie w przemyśle), gdy stężenia substancji rozproszonych są wysokie (nawet bliskie maksymalnym wartościom nasycenia), lecz zmieniają się one na tyle słabo, że zmiany te można pominąć. W takim przypadku możemy operować stałą gęstością średnią

$$\rho = \rho_0 + \left(\overline{\sum_{i=1}^{I_m} c_i} \right). \quad (4.184)$$

Osobno natomiast trzeba natomiast analizować zależność gęstości od temperatury i ciśnienia. W przyjętej jako bazowa wersji równania stanu (4.178) czynniki te wpływają na gęstość rozpuszczalnika, toteż jeśli nawet pominiemy obecność substancji rozproszonej, to (szczególnie dla gazów) możemy być zmuszeni do uwzględnienia zależności tej gęstości od T oraz/lub od p . Mamy wtedy

$$\rho = \rho'_0(p, T) \text{ lub } \rho = \rho'_0(T) \text{ lub } \rho = \rho'_0(p). \quad (4.185)$$

Odpowiednie zależności omówiliśmy w podrozdz. 4.5.

Jeżeli więc będziemy rozważali ruch płynu niejednorodnego o pomijalnie małej zmienności stężenia substancji rozproszonych, lecz ściśliwego (czyli o gęstości zależnej od ciśnienia), to pole jego prędkości i ciśnienia wyznaczamy z następującego układu:

— równanie zachowania masy płynu w postaci (4.175);

— równanie zachowania pędu płynu (4.176), uproszczone dzięki założeniu $\mu = \text{const}$ do postaci [101]

$$\rho \frac{D\mathbf{u}_b}{Dt} = \rho \mathbf{f}_z - \nabla \left(p - \frac{1}{3} \mu \text{div} \mathbf{u}_b \right) + \mu \Delta \mathbf{u}_b, \quad (4.186)$$

— równanie stanu

$$\rho = \rho'_0(p). \quad (4.187)$$

Natomiast gdy gęstość tego płynu zmienia się wraz z temperaturą, wtedy zamiast ostatniej relacji piszemy, że

$$\rho = \rho'_0(p, T) \text{ lub tylko } \rho = \rho'_0(T), \quad (4.188)$$

zaś cały układ (zawierający też równania (4.186) i (4.187)) musimy rozwiązywać wraz z równaniem zachowania energii, określającym rozkład temperatury. W tym przypadku mamy $D_w = \text{const}$, więc

$$\frac{DT}{Dt} = D_w \Delta T + q_{es}. \quad (4.189)$$

Po wyznaczeniu pól prędkości i ciśnienia (oraz ewentualnie temperatury), możemy określić pole stężenia każdej z I_m substancji rozproszonych, rozwiązując odpowiednią liczbę razy równanie (4.174), które w tym przypadku (wobec $D_{Mi} = \text{const}$) ma postać

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \text{div}(c_i \mathbf{u}_b) = D_{Mi} \Delta c_i + Z_i. \quad (4.190)$$

Dalsze upraszczanie równań jest możliwe, jeżeli przyjmiemy założenie o *dynamicznej pasywności* substancji rozpuszczonych oraz energii cieplnej, zgodnie z (4.181). „Równania ruchu” (jak potocznie określa się równania zachowania masy i pędu) przyjmują wtedy postać klasycznych równań Naviera-Stokesa dla cieczy o stałej gęstości [101]

$$\text{div} \mathbf{u}_b = 0, \quad (4.191)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{u}_b}{Dt} = \rho \mathbf{f}_z - \nabla p + \mu \Delta \mathbf{u}_b, \quad (4.192)$$

natomiast lewa strona równania transportu masy może być dodatkowo uproszczona, bowiem

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \text{div}(c_i \mathbf{u}_b) = \frac{\partial c_i}{\partial t} + (\mathbf{u}_b \nabla) c_i + c_i \text{div} \mathbf{u}_b = \frac{Dc_i}{Dt}. \quad (4.193)$$

Ostatecznie więc mamy następujące równanie zachowania masy substancji rozproszonej (odnoszące się do tak zwanego „przybliżenia dyfuzyjnego” [69]):

$$\frac{Dc_i}{Dt} = D_{Mi} \Delta c_i + Z_i. \quad (4.194)$$

Równanie zachowania energii ma tu również postać (4.189).

Zauważmy, że relacje (4.189) i (4.194) mają z czysto matematycznego punktu widzenia postacie identyczne (choć fizyczne znaczenia występujących w nich funkcji są zupełnie odrębne). Do celów formalnych wygodnie jest więc wprowadzić jedno uogólnione *równanie transportu wielkości skalarnej* s_p

$$\frac{Ds_p}{Dt} = D_s \Delta s_p + Z_s. \quad (4.195)$$

Symbol s_p może oznaczać albo stężenie i -tej substancji rozproszonej ($s_p = c_i$), albo temperaturę ($s_p = T$), albo też każdą inną funkcję typu skalarnego (co jest wykorzystywane na przykład w teorii ruchu burzliwego, patrz par. 6.1.4). Symbole D_s i Z_s oznaczają tu odpowiednio uogólniony współczynnik transportu wielkości skalarnej oraz wypadkową funkcję źródłową dla tej wielkości.

Omówione wyżej praktyczne warianty bazowego układu równań ruchu płynu niejednorodnego kryją w sobie też pewne uproszczenia, dotyczące pola prędkości mieszaniny. Nie ma to bezpośredniego znaczenia w zastosowaniach, lecz jest istotne przy bliższej analizie problemu, toteż poświęćmy tej kwestii nieco uwagi.

Z postaci równania zachowania masy (4.191) wynika, że prędkość interesującego nas płynu niejednorodnego jest taka sama, jak gdyby był to płyn jednorodny. Tymczasem zgodnie z (2.19) prędkość barycentryczna jest średnią z prędkości poszczególnych składników mieszaniny, uwzględniających także ruch dyfuzyjny z prędkością względną \mathbf{u}_i^* . Innymi słowy, w omawianym tu modelu praktycznym faktycznie posługujemy się prędkością rozpuszczalnika, czyli przyjmujemy założenie, że

$$\mathbf{u}_b = \mathbf{u}_0. \quad (4.196)$$

Zgodnie z (2.20) jest to dopuszczalne wtedy, gdy prędkości względne są pomijalnie małe

$$\mathbf{u}_i^* \cong 0. \quad (4.197)$$

Aby sprawdzić, czy warunek ten jest spełniony, musimy znać rozkład stężenia i -tej substancji, co pozwala wyznaczyć prędkość względną, gdyż z relacji (4.13) i (4.84) otrzymujemy następującą równość:

$$\mathbf{u}_i^* = -\frac{D_{M_i}}{c_i} \text{grad } c_i. \quad (4.198)$$

Jak widać, dopuszczalność założenia o dynamicznej pasywności substancji rozpuszczonej można sprawdzić dopiero po rozwiązaniu całego zadania. Na szczęście w zagadnieniach migracji zanieczyszczeń warunek (4.197) jest z reguły spełniony, wobec czego w dalszym ciągu będziemy opuszczać wszelkie indeksy przy symbolu prędkości adwekcji, oznaczając ten wektor przez \mathbf{u} .

Powyższa uwaga dotyczy również bardziej ogólnej kwestii zakresu stosowalności poszczególnych modeli transportu masy i energii. Wybór modelu bardziej rozbudowanego (danego przez równania bazowe, omówione w podrozdz. 4.7, lub przez jeszcze ogólniejsze zależności, przedstawione w paragrafach wcześniejszych) zapewnia dokładniejszy opis interesujących nas zjawisk, lecz jednocześnie sprawia, że proces rozwiązywania zagadnienia jest bardziej czasochłonny i kosztowny, a wynik – z reguły obarczony większym błędem obliczeniowym (gdyż ze względu na złożoność tych równań są one rozwiązywane najczęściej metodami przybliżonymi). Z kolei modele uproszczone (w szczególności ich wersje

praktyczne, omówione w poprzednim podrozdziale) obciążone są pewnymi założeniami, lecz pozwalają na stosunkowo szybkie uzyskanie rozwiązania, obciążonego względnie niewielkimi błędami rachunkowymi.

W praktyce inżynierii środowiska najczęściej stosujemy równania transportu w wersji (4.189) oraz (4.194).

4.9. Uprozczone wprowadzenie praktycznych równań transportu

4.9.1. Uwagi wstępne

Nasze dotychczasowe rozważania prowadzone były w sposób niemal drobiazgowy, bowiem tylko szczegółowa analiza mechanizmów interesujących nas procesów jednostkowych, sposobów ich formalnego opisu i konsekwencji wprowadzanych uproszczeń daje gwarancję poprawnego rozwiązywania problemów praktycznych oraz stwarza podstawy do dalszych prac badawczych.

Jednakże procesy migracji zanieczyszczeń mogą interesować również osoby zorientowane bardziej praktycznie, dla których ważne są nie fizyczna i formalna geneza odpowiednich równań, lecz tylko ich robocza postać (co najwyżej wzbogacona o ogólną interpretację fizycznego sensu użytych tam symboli matematycznych) oraz sposoby rozwiązywania konkretnych zagadnień.

Dla tego typu użytkowników modeli transportu, w niniejszym podrozdziale przedstawiona zostanie uproszczona metoda wyprowadzania równania dyfuzji oraz równania przewodnictwa cieplnego. Daje ona możliwość ogólnego zorientowania się w istocie równań transportu, niezależnie od treści poprzednich paragrafów tego rozdziału, przy stosunkowo ograniczonych wymaganiach odnośnie do stopnia przygotowania matematycznego.

4.9.2. Podstawowe założenia modelu

Rozważać będziemy roztwory płynne. Liczba składników takich roztworów może być dowolna ($i = 1, 2, \dots, I_m$), przy czym zmienność stężenia tych składników musi być na tyle umiarkowana, żeby ich obecność praktycznie nie wpływała na pole prędkości roztworu.

Inaczej mówiąc, pole prędkości roztworu może co najwyżej w pomijalnie małym stopniu różnić się od pola prędkości, które w tym samym obszarze i przy tych samych wymuszeniach panowałoby w układzie wypełnionym czystym rozpuszczalnikiem lub rozważanym roztworem, lecz o stałym, uśrednionym stężeniu.

Wymóg ten może budzić zastrzeżenia, gdy rozważa się warunki ruchu substancji niejednorodnych, występujące w warunkach przemysłowych. Jednakże w sytuacjach istotnych w problematyce inżynierii i ochrony środowiska, którym poświęcona jest niniejsza praca, z reguły możemy powyższy warunek zaakceptować.

Gdy nie jest to możliwe, jednocześnie z analizą zachowania się poszczególnych substancji rozpuszczonych musimy analizować ruch roztworu jako całości. Przypadek taki, w wersji ogólnej, już rozważaliśmy (patrz podrozdz. 4.2).

Tak więc w omawianym tu modelu wektor prędkości \mathbf{u} oraz ciśnienie p i gęstość dla roztworu możemy wyznaczyć uprzednio i niezależnie od analizy zmienności stężenia każdej z substancji rozpuszczonych, korzystając ze znanych metod mechaniki płynów i hydrauliki (na przykład [101, 134]).

Ruch każdego ze składników roztworu opisywać będziemy za pomocą pojęć mechaniki ośrodków ciągłych. Gęstość rozkładu masy i -tej substancji rozpuszczonej opisuje jej *stężenie* (patrz par. 2.2.5), zaś masę tej substancji traktować będziemy jako ciągły „obłok”, rozproszony (ze zróżnicowaną intensywnością) w części lub całości rozważanego obszaru. Jak wykazuje nawet prosta obserwacja, „obłok” taki cechuje się własną dynamiką i przemieszcza się w przestrzeni w pewnym stopniu niezależnie od ruchu rozpuszczalnika (który przecież może w ogóle nie występować). Z tego względu celowe jest zdefiniowanie prędkości ruchu i -tego składnika roztworu \mathbf{u}_i (niezależnie od omówionej już prędkości całego roztworu \mathbf{u}).

W dalszych rozważaniach musimy też uwzględnić czynnik bardzo ważny pod względem ekologicznym, jakim są przemiany i reakcje, zachodzące między substancjami rozpuszczonymi. Każda z nich może być w wyniku tych przemian produkowana, lub zużywana, a liczba tych reakcji może być teoretycznie dowolna. Wprowadźmy więc dla każdego ze składników *funkcję źródłową* z_{ij} (indeks i oznacza składnik, zaś indeks j – kolejną reakcję, przy czym $j = 1, 2, \dots, J_r$). Sposób wyznaczania tych funkcji będzie omówiony w podrozdz. 4.10. Gdy $z_{ij} = 0$, to i -tą substancję nazywamy *trwałą (zachowawczą, nierozkładalną, chemicznie bierną)*.

4.9.3. Równanie zachowania masy i -tego składnika roztworu

Każde równanie fizyki matematycznej jest formalnym wyrazem jakiegoś prawa natury. W rozważanym tu przypadku rozprzestrzeniania się substancji rozpuszczonej interesuje nas rozkład masy tej substancji. Analiza licznych wyników obserwacji procesów, zachodzących tak w naturze, jak i w obiektach technicznych, prowadzi do wniosku, że masa każdego składnika w układzie może ulegać zmianie wskutek różnych intensywności dopływu tego składnika do układu i jego odpływu z układu, oraz wskutek jego produkcji lub rozkładu w wyniku ewentualnie zachodzących reakcji. Stwierdzenie to można ująć w następujące *prawo zachowania masy i -tego składnika roztworu*:

Zmiana w czasie masy i -tej substancji rozpuszczonej w płynie równa jest wypadkowemu strumieniowi masy tej substancji przez zewnętrzną powierzchnię układu oraz sumie intensywności procesów źródłowych.

Zapiszmy to prawo w postaci ilościowej. Aby uniezależnić się od rzeczywistych kształtów układów, które każdorazowo określają indywidualną charakterystykę rozważanego zagadnienia, analizować będziemy masę i -tego składnika w bardzo małym prostopadłościanie o bokach Δx , Δy i Δz (rys. 4.11). Jego objętość jest równa

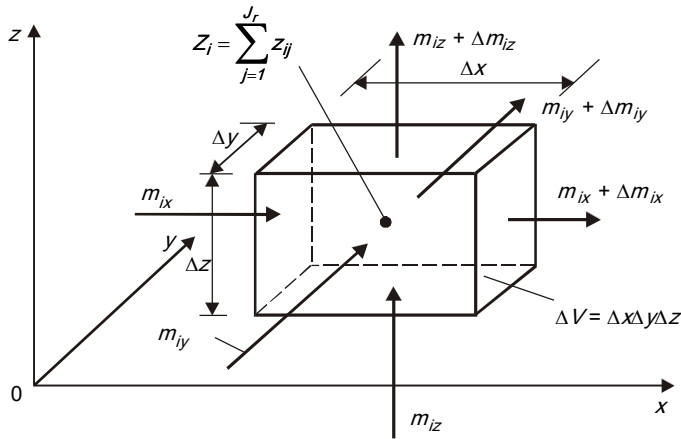
$$\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z, \quad (4.199)$$

zaś masę i -tej substancji rozpuszczonej w chwili czasu t określa równość

$$M_{ri} = c_i \Delta V. \quad (4.200)$$

Po upływie czasu Δt masa ta w ogólnym przypadku może ulec zmianie i być równa

$$M_{ri} + \Delta M_{ri} = (c_i + \Delta c_i) \Delta V. \quad (4.201)$$



Rys. 4.11. Bilans masy substancji rozpuszczonej w elementarnej objętości dV

Zmiana masy w czasie wynosi więc

$$\frac{\Delta M_{ri}}{\Delta t} = \frac{\Delta c_i}{\Delta t} \Delta V. \quad (4.202)$$

Jak już zaznaczono, zmiana ta jest związana z ruchem masy względem objętości. Ruch ten może być dowolnie ukierunkowany w przestrzeni, toteż rozważać będziemy jego składowe wzdłuż osi układu współrzędnych. Strumień masy substancji o stężeniu c_i , przemieszczającej się z prędkością \mathbf{u}_i przez powierzchnię ΔS , prostopadłą do kierunku ruchu, jest równy

$$\mathbf{m}_i = c_i \mathbf{u}_i \Delta S. \quad (4.203)$$

Zgodnie ze schematem, pokazanym na rys. 4.11, możemy więc następująco wyrazić dopływający strumień masy:

$$m_{di} = m_{ix} + m_{iy} + m_{iz} = c_i u_{ix} \Delta y \Delta z + c_i u_{iy} \Delta x \Delta z + c_i u_{iz} \Delta x \Delta y. \quad (4.204)$$

Analogicznie dla strumienia odpływającego z objętości ΔV mamy

$$\begin{aligned} m_{oi} &= (m_{ix} + \Delta m_{ix}) + (m_{iy} + \Delta m_{iy}) + (m_{iz} + \Delta m_{iz}) = \\ &= (c_i + \Delta c_i) u_{ix} \Delta y \Delta z + (c_i + \Delta c_i) u_{iy} \Delta x \Delta z + \\ &+ (c_i + \Delta c_i) u_{iz} \Delta x \Delta y. \end{aligned} \quad (4.205)$$

Strumień netto wyniesie więc

$$\Delta m_i = m_{di} - m_{oi} = -\Delta c_i u_{ix} \Delta y \Delta z - \Delta c_i u_{iy} \Delta x \Delta z - \Delta c_i u_{iz} \Delta x \Delta y. \quad (4.206)$$

Drugim czynnikiem, wywołującym w czasie Δt zmianę masy o wartość ΔM_{pi} , są reakcje i przemiany. Skoro intensywność każdej z nich (odniesioną do jednostki objętości) opisałismy funkcją źródłową z_{ij} , to łączna zmiana masy i -tego składnika wyniesie

$$\frac{\Delta M_{pi}}{\Delta t} = \sum_{j=1}^{J_r} z_{ij} \Delta V = Z_i \Delta V. \quad (4.207)$$

Zgodnie z rozważanym tu prawem zachowania masy mamy

$$\frac{\Delta M_{ri}}{\Delta t} = \Delta m_i + \frac{\Delta M_{Pi}}{\Delta t}. \quad (4.208)$$

Podstawiając w powyższym relacje (4.201), (4.206) i (4.207) oraz dzieląc obie strony tego równania przez ΔV według (4.199), po wykonaniu prostych przekształceń otrzymamy następujące równanie różnicowe:

$$\frac{\Delta c_i}{\Delta t} + u_{ix} \frac{\Delta c_i}{\Delta x} + u_{iy} \frac{\Delta c_i}{\Delta y} + u_{iz} \frac{\Delta c_i}{\Delta z} = Z_i. \quad (4.209)$$

Odnosi się ono do każdego ze składników rozważanego roztworu, toteż niewygodnie jest posługiwać się odrębnymi prędkościami tych składników. Przedstawmy więc \mathbf{u}_i jako sumę prędkości całego roztworu („wspólnej” dla każdego ze składników) oraz prędkości względnej \mathbf{u}_i^* („odrębnej” dla każdego ze składników), pisząc

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{u} + \mathbf{u}_i^*. \quad (4.210)$$

Po podstawieniu ostatniej relacji do (4.209) otrzymamy

$$\frac{\Delta c_i}{\Delta t} + u_x \frac{\Delta c_i}{\Delta x} + u_y \frac{\Delta c_i}{\Delta y} + u_z \frac{\Delta c_i}{\Delta z} = -\frac{\Delta m_{wix}}{\Delta x} - \frac{\Delta m_{wiy}}{\Delta y} - \frac{\Delta m_{wiz}}{\Delta z} + Z_i. \quad (4.211)$$

Symbole m_{wix} , m_{wiy} i m_{wiz} oznaczają tu względne strumienie masy i -tego składnika, odpowiednio w kierunkach x , y i z , przy czym

$$m_{wix} = u_{ix}^* \Delta c_i, \quad m_{wiy} = u_{iy}^* \Delta c_i, \quad m_{wiz} = u_{iz}^* \Delta c_i. \quad (4.212)$$

Relacje powyższe mają charakter *różnicowy*, gdyż występują w nich małe przyrosty funkcji, oznaczone symbolem Δ . Jak wiadomo z klasycznej analizy matematycznej, gdy przyrosty te zmierzają do zera, wtedy *różnice* przechodzą w *różniczki*, zaś *ilorazy różnicowe* można zastąpić przez *pochodne*. Wobec tego równanie (4.212) można przepisać w następującej *postaci różniczkowej*:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + u_x \frac{\partial c_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial c_i}{\partial y} + u_z \frac{\partial c_i}{\partial z} = -\frac{\partial m_{wix}}{\partial x} - \frac{\partial m_{wiy}}{\partial y} - \frac{\partial m_{wiz}}{\partial z} + Z_i. \quad (4.213)$$

4.9.4. Prawo Ficka

Możliwość wykorzystania równania (4.213) uwarunkowana jest uprzednim określeniem strumienia względnego \mathbf{m}_{wi} . Kwestia ta była szczegółowo analizowana i przystępnie omówiona w punkcie 4.4.2, co doprowadziło do sformułowania klasycznego *prawa Ficka* (4.84), zgodnie z którym:

$$m_{wix} = -D_{Mi} \frac{\partial c_i}{\partial x}, \quad m_{wiy} = -D_{Mi} \frac{\partial c_i}{\partial y}, \quad m_{wiL} = -D_{Mi} \frac{\partial c_i}{\partial x}. \quad (4.214)$$

4.9.5. Równanie adwekcji-dyfuzji ze źródłami

Podstawiając (4.214) do (4.213) otrzymujemy następującą praktyczną wersję równania zachowania masy i -tego składnika roztworu, zwaną potocznie *równaniem adwekcji-dyfuzji ze źródłami* (przy założeniu, że $D_{Mi} = \text{const}$, patrz pkt 4.4.2.2):

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + u_x \frac{\partial c_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial c_i}{\partial y} + u_z \frac{\partial c_i}{\partial z} = D_{Mi} \left(\frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2} \right) + Z_i. \quad (4.215)$$

Dla uproszczenia zapisu możemy używać skróconej symboliki matematycznej, wprowadzając następujące operatory:

$$u_x \frac{\partial}{\partial x} + u_y \frac{\partial}{\partial y} + u_z \frac{\partial}{\partial z} = (\mathbf{u} \nabla), \quad (4.216)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \Delta, \quad (4.217)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla) = \frac{D}{Dt}. \quad (4.218)$$

Pozwalają one zamiast (4.215) napisać, że

$$\frac{Dc_i}{Dt} = D_{Mi} \Delta c_i + Z_i. \quad (4.219)$$

4.9.6. Równanie przewodnictwa cieplnego

W pierwszych punktach podrozdz. 4.9 rozważaliśmy uproszczony model transportu substancji rozpuszczonej w ośrodku płynnym. W zagadnieniach ekologicznych interesować nas może także proces transportu energii cieplnej. Jeżeli przyjmiemy założenia upraszczające, omówione w punkcie 4.9.2, także dla ruchu płynu o zmiennej temperaturze (czyli przyjmiemy, że temperatura nie wpływa na pole prędkości płynu jednorodnego lub roztworu), to równanie opisujące ewolucję pola temperatury otrzymamy w sposób formalnie identyczny z opisany w punkcie 4.9.3, według schematu pokazanego na rys. 4.11. Musimy jedynie zastąpić tam stężenie składnika przez energię wewnętrzną płynu e (która może być wyrażona przez temperaturę płynu T , zgodnie z równaniem kalorycznym (4.144)), sumę funkcji źródłowych Z_i zamienić na sumę funkcji, opisujących produkcję oraz/lub pobór energii cieplnej q_{es} , zaś względny strumień masy zastąpić przez względny strumień energii cieplnej \mathbf{q}_d , opisany prawem Fouriera (4.99).

Po wykonaniu omówionych już przekształceń, otrzymamy następujące *równanie adwekcji-przewodnictwa ze źródłami*:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} = D_w \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + q_{es}, \quad (4.220)$$

które w formie operatorowej ma następującą postać:

$$\frac{DT}{Dt} = D_w \Delta T + q_{es}. \quad (4.221)$$

4.10. Funkcje źródłowe

4.10.1. Uwagi ogólne

Bieg reakcji i przemian chemicznych, biologicznych oraz/lub fizycznych zaczyna się z chwilą wejścia ze sobą w kontakt substancji, które w danej reakcji biorą udział (*substratów*), lub z chwilą wytworzenia warunków, umożliwiających zachodzenie przemiany, której dana substancja podlega.

W trakcie każdej reakcji lub przemiany maleje masa jej *substratów*, a rośnie masa jej *produktów*. Przebiegowi takiego zjawiska mogą towarzyszyć mniej lub bardziej wyraźne objawy zewnętrzne (zmiana koloru substancji lub jej stanu skupienia, wydzielanie pęcherzyków gazu lub cząsteczek zawiesiny itp.). Ułatwiają one (o ile dadzą się zaobserwować) jakościową ocenę przebiegu reakcji, jednak w celu oceny ilościowej niezbędna jest kontrola stężeń substratów oraz/lub produktów.

Od rozpoczęcia do zakończenia reakcji lub przemiany zawsze musi upłynąć pewien czas. Niekiedy jest on bardzo krótki, do tego stopnia, że nawet jego pomiar stwarza duże trudności. Do tego typu procesów chemicznych należą reakcje zobojętniania oraz wymiany (które prowadzą do wytrącania się słabo rozpuszczalnych produktów). Inne reakcje zachodzą dużo wolniej, w czasie mierzonym godzinami, lub nawet dobami (na przykład – polimeryzacja), zaś są i takie, których przebieg trudno zauważyć. Na przykład efekty reakcji między tlenem a wodorem w warunkach normalnych są praktycznie niezauważalne nawet po upływie lat, natomiast ma ona charakter natychmiastowy jeśli zostanie zapoczątkowana, choćby przez wyładowanie elektryczne.

Czas przebiegu reakcji jest więc przy rozważaniu problemów ewolucji pól stężeń substancji rozproszonych, zarówno w warunkach naturalnych, jak i technicznych (oczyszczalnie wody i ścieków), niesłychanie istotnym parametrem. Gdy jest on bardzo krótki, wtedy za podstawowy warunek właściwej pracy *reaktora* (czyli obiektu, w którym zachodzi reakcja) należy uznać całkowite wymieszanie substratów, co nie jest trudne do spełnienia. Rzecz się komplikuje wtedy, gdy czas reakcji jest znaczący. Najczęściej z upływem tego czasu efektywność przemiany maleje (patrz par. 4.10.2). W praktyce najczęściej określamy *miarodajny czas reakcji* t_{rm} , który zapewnia osiągnięcie niezbędnego efektu końcowego. W zagadnieniach oczyszczania wody i ścieków efekt ten z reguły określany jest przepisami, zawierającymi wymogi odnośnie do jakości wody oraz wyznaczającymi możliwości odprowadzenia ścieków. Często są to wymogi bardzo ostre, przekraczające 90% maksymalnej wydajności reakcji. Przykładowo, stężenie substancji organicznej w surowych ściekach miejskich, wyrażone jako BZT₅, przekracza 300 mg O₂/dm³, a w ściekach przemysłowych jest kilkakrotnie wyższe (przy produkcji penicyliny sięga 3000 mg O₂/dm³). Zgodnie zaś z obowiązującymi przepisami, przed odprowadzeniem oczyszczonych ścieków do odbiornika stężenie to należy obniżyć do poziomu nieprzekraczającego 30 mg O₂/dm³.

Na etapie projektowania urządzeń do oczyszczania wody lub ścieków z reguły dobiera się parametry technologiczne poszczególnych reaktorów tak, aby *efektywny czas zatrzymania* płynu t_{ze} był równy *miarodajnemu czasowi reakcji* t_{rm} , czyli aby

$$t_{ze} = t_{rm}. \quad (4.222)$$

Gdy proces przebiega w układzie zamkniętym (*reaktor okresowy*), warunek ten można spełnić bez trudu (regulując upływ czasu między napełnianiem a opróżnianiem reaktora). Jednakże najczęściej mamy do czynienia z *reaktorami przepływowymi*, dla których wyznaczenie efektywnego czasu zatrzymania jest złożonym zadaniem hydromechaniki. Dodatkowo trzeba pamiętać, że regulacja czasu zatrzymania w raz wybudowanym reaktorze jest zadaniem złożonym i kosztownym, więc nie zawsze jest praktycznie możliwa do przeprowadzenia. Z tego względu kwestia hydraulicznych warunków pracy reaktora powinna być bardzo starannie rozważana już w fazie projektowej. Uwaga ta dotyczy nie tylko obiektów technicznych, lecz także systemów naturalnych, będących przedmiotem zainteresowania inżynierii środowiska.

4.10.2. Kinetyka procesów

Problemem szybkości, z jaką przebiegają poszczególne reakcje lub przemiany, w każdej dyscyplinie nauk przyrodniczych i technicznych zajmuje się osobny jej dział, zwany *kinetyką procesów*. W dalszym ciągu interesować nas będą *kinetyka chemiczna*, *kinetyka biologiczna* oraz *kinetyka przemian fizycznych*.

Miarą *szybkości reakcji* lub *szybkości przemiany* jest liczba jednostek masy substancji, które w jednostce czasu uległy reakcji lub przemianie (rozkładowi, produkcji lub zmianie postaci).

Na poziomie elementarnym szybkość reakcji uwarunkowana jest liczbą zderzeń między reagującymi molekułami, przy czym chodzi tu o *zderzenia efektywne* (czyli takie, które kończą się zejściem reakcji). Nie każde bowiem zderzenie cząstek doprowadza do pożądanego wyniku. Warunkiem efektywności jest odpowiednio wysoka wartość energii kinetycznej cząsteczek, zwana *energią aktywacji*.

W świetle powyższego jest oczywiste, że szybkość procesu zależy od łatwości wzajemnego kontaktu między drobinami. Najlepsze warunki mają więc mieszaniny gazowe (o największej ruchliwości cząsteczek) i ciekłe oraz roztwory ciekłe. Gdy niektóre substraty znajdują się w stanie stałym, to przynajmniej jeden z nich dobrze jest utrzymywać w stanie płynnym (ciekłym lub gazowym). W przeciwnym razie szybkość reakcji jest z reguły bardzo ograniczona.

Prawdopodobieństwo zderzeń między molekułami rośnie też z prędkością ich ruchu chaotycznego. Oznacza to, że szybkość reakcji chemicznej wzrasta z temperaturą układu. Przybliżonym wyrazem tego stwierdzenia jest *reguła van't Hoffa*. Mówi ona, że szybkość reakcji rośnie w stałym stosunku przy wzroście temperatury układu o każde 10 stopni (Kelvina lub Celsjusza). Jeżeli szybkość procesu wyrazimy przez *stałą szybkości reakcji k* (patrz wzór 4.224), to reguła ta mówi, że

$$k(T)/k(T - 10^\circ) = H_R . \quad (4.223)$$

Współczynnik temperatury H_R zależy od rodzaju reakcji. Przykładowo:

- hydroliza sacharozy (w temp. 25 – 55°C) – $H_{RS} = 3,6$;
- fermentacja alkoholu (w temp. 30 – 70°C) – $H_{RA} = 2,0$;
- oddychanie roślin (w temp. 0 – 25°C) – $H_{RR} = 2,5$;
- rozwój jajeczek żaby (w temp. 0 – 25°C) – $H_{RJ} = 2,7$.

Kolejnym czynnikiem, przyspieszającym szybkość reakcji, jest stężenie każdego z substratów. Jego wzrost zwiększa całkowitą liczbę zderzeń efektywnych. W przypadku

mieszanin gazowych, stężenie to może być wyrażane przez ciśnienie cząstkowe każdego ze składników.

W układach wielofazowych poważne znaczenie ma też wielkość powierzchni międzyfazowej. Im jest ona większa, tym większa jest szybkość reakcji. Z tego względu, na przykład podczas natleniania wody lub ścieków, staramy się wtłaczać do cieczy jak najdrobniejsze pęcherzyki gazu (przy natlenianiu sprężonym gazem) lub też staramy się rozбивać ciecz na możliwie drobne kropelki (w systemach napowietrzania mechanicznego).

Duże, a niekiedy zasadnicze, znaczenie ma też obecność *katalizatorów*. Są to substancje, które w różny sposób (najczęściej przez tworzenie z substratami nietrwałych połączeń przejściowych) przyspieszają przebieg procesu, nie ulegając przy tym przemianie. Analogiczne substancje, zwalniające tempo reakcji, nazywamy *inhibitorami*. W niektórych przypadkach wpływ na kinetykę procesu mają też inne czynniki (*pH*, warunki mieszania, promieniowanie elektromagnetyczne i in.).

Niektóre reakcje i przemiany są bardzo złożone, a ilościowy opis ich przebiegu jest bardzo skomplikowany (o ile w ogóle możliwy). Jednakże bardzo wiele takich procesów można scharakteryzować, wprowadzając pojęcie *rzędu reakcji*. Pojawia się ono, gdy wiążemy szybkość przebiegu tej reakcji ze stężeniem substancji reagującej (lub kilku takich substancji).

Jeżeli szybkość reakcji (określona zmianą stężenia *A*-tego składnika w czasie) jest proporcjonalna do tego stężenia w pierwszej potęgce, to mamy do czynienia z *reakcją pierwszego rzędu*

$$\frac{dc_A}{dt} = -k_A c_A. \quad (4.224)$$

Mnożnik k_A , zależny od temperatury zgodnie z regułą van't Hoffa (4.223), zwany *stałą szybkości reakcji*, jest wielkością charakterystyczną dla tej przemiany w określonych warunkach. Przyjęto, że współczynniki k (niezależnie od ich dodatkowego indeksu) są zawsze dodatnie, zaś kierunek reakcji uwzględniamy znakiem prawej strony relacji kinetycznej — opatrujemy ją mianowicie znakiem „minus” gdy substancja ulega rozkładowi, zaś znakiem „plus” gdy jest ona wytwarzana.

Reakcją drugiego rzędu nazywamy taką przemianę, której szybkość jest proporcjonalna do kwadratu stężenia jednego z substratów, lub do iloczynu dwóch stężeń

$$\frac{dc_A}{dt} = -k_A c_A^2 \text{ lub } \frac{dc_A}{dt} = -k_{AB} c_A c_B. \quad (4.225)$$

Wreszcie szybkość *reakcji trzeciego rzędu* proporcjonalna jest do iloczynu trzech stężeń (które mogą się powtarzać, dając drugą lub trzecią potęgę któregoś ze stężeń), co można zapisać w różny sposób, na przykład jako

$$\frac{dc_A}{dt} = \frac{dc_B}{dt} = \frac{dc_C}{dt} = k c_A c_B c_C, \quad (4.226)$$

lub

$$\frac{dc_A}{dt} = -k_{AB} c_A^2 c_B. \quad (4.227)$$

Możliwe są oczywiście także inne kombinacje.

Analogicznie zdefiniować można reakcje wyższych rzędów, lecz w praktyce nie spotyka się ich, toteż nie będziemy ich tu rozważali. Zaznaczmy tylko jeszcze, że możliwe są także *reakcje rzędu zerowego*, opisane relacją

$$\frac{dc_A}{dt} = k = \text{const.} \quad (4.228)$$

W takim przypadku szybkość przemiany jest zawsze stała i nie zależy od stężenia substratów ani produktów.

Niekiedy możemy mieć do czynienia z nieco odmienną sytuacją, gdy szybkość reakcji nie jest proporcjonalna do stężenia któregoś z reagentów, lecz do jego *deficytu*, definiowanego jako różnica między odpowiednim stężeniem nasycenia a stężeniem aktualnym

$$D_i = c_{ni} - c_i. \quad (4.229)$$

Przykład 4.3

Określić czas, po upływie którego 90% sacharozy, rozpuszczonej w 0,1 N kwasie siarkowym, ulegnie inwersji (rozpadowi na cukry proste).

Rozwiązanie

Omawiana reakcja może być opisana zależnością I rzędu (4.224). Jest to bardzo proste równanie różniczkowe, w którym możemy rozdzielić zmienne, pisząc

$$\frac{dc_s}{c_s} = -k_s dt,$$

a następnie obliczyć jedną kwadraturę, co daje

$$\ln c_s = -k_s t + A.$$

Stałą całkowania A wyznaczymy z warunku początkowego, mówiącego iż $c_s = c_{s0}$ dla $t = 0$, skąd

$$A = \ln c_{s0}.$$

Po wykonaniu prostych przekształceń mamy

$$c_s(t) = c_{s0} \exp(-k_s t). \quad (4.230)$$

Jest to równanie krzywej wykładniczej. Stanowi ono *typową relację, opisującą większość prostych procesów, przebiegających jak reakcje I rzędu*. Czasową charakterystykę tej przemiany obrazują wykresy na rys. 4.12, wykonane dla trzech stałych szybkości reakcji:

- 1) $k_{s1} = 0,00000443$ (1/s) dla temperatury 20°C;
- 2) $k_{s2} = 0,00001830$ (1/s) dla temperatury 30°C;
- 3) $k_{s3} = 0,00022900$ (1/s) dla temperatury 50°C.

Szukany czas t_{90} , po upływie którego efektywność reakcji sięgnie 90%, możemy odczytać z rys. 4.12, lecz dokładniej będzie obliczyć go z równania (4.230), które pozwala napisać, że

$$c_s(t_{90})/c_{s0} = 0,10 = \exp(-k_s t_{90}),$$

skąd

$$t_{90} = 0,203/k_s.$$

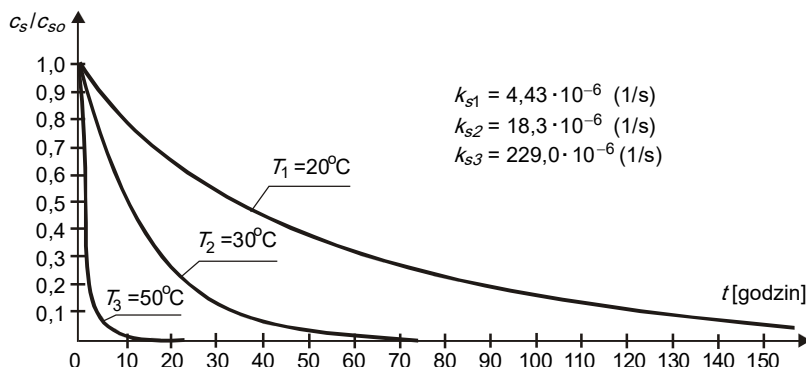
Dla przyjętych powyżej wartości liczbowych k_s mamy:

— $t_{90,1} = 144,4$ godz. ($T = 20^\circ\text{C}$);

— $t_{90,2} = 35,0$ godz. ($T = 30^\circ\text{C}$);

— $t_{90,3} = 2,8$ godz. ($T = 50^\circ\text{C}$).

Widać tu wyraźnie, że czas przebiegu reakcji może być znaczny, a ponadto – jak dalece zależy on od temperatury.



Rys. 4.12. Przebieg inwersji sacharozy (przykład 4.3) ■

4.10.3. Funkcje źródłowe w inżynierii środowiska

4.10.3.1. Uwagi ogólne. Wśród reakcji i przemian, jakie pojawiają się w polu widzenia ochrony i inżynierii środowiska, jak też inżynierii sanitarnej, podstawowe i zasadnicze znaczenie mają te procesy, które prowadzą do obniżenia stężeń zawartych w wodzie lub w ściekach substancji zanieczyszczających [105].

Generalna charakterystyka tych procesów jest jednakowa, niezależnie od tego, czy zachodzą one w systemach naturalnych, czy też w obiektach technicznych. Z tego względu należy omawiać je łącznie. Z drugiej jednak strony w obu tych ujęciach pojawiają się pewne różnicowania, na które trzeba zwrócić uwagę.

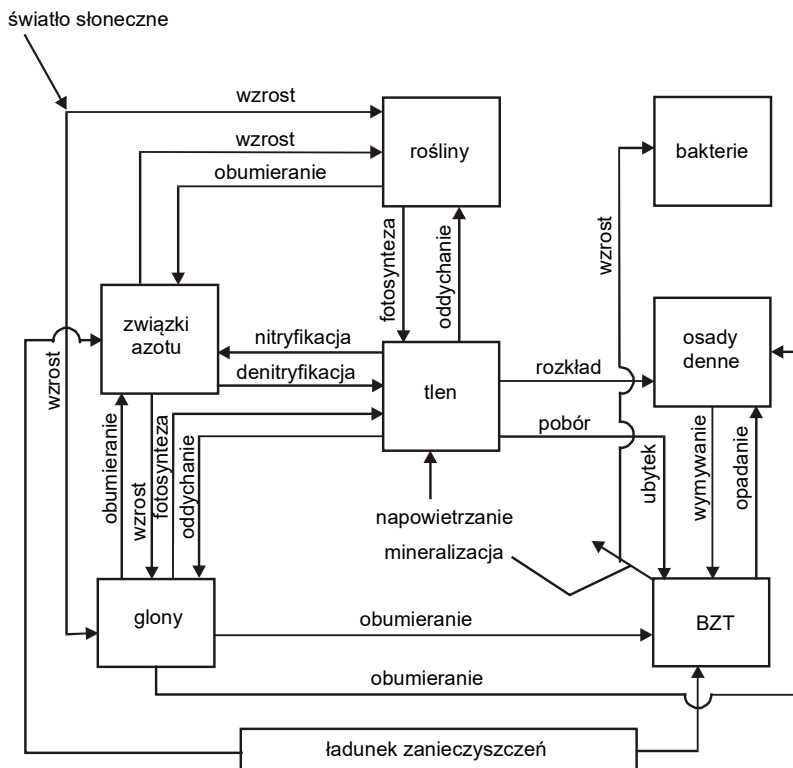
W tradycyjnym ujęciu procesy źródłowe można podzielić na trzy następujące kategorie:

- 1) *procesy chemiczne* (gdy w trakcie zachodzących reakcji jedne substancje nieożywione ulegają przemianom w inne substancje nieożywione);
- 2) *procesy fizyczne* (powodujące zmiany własności materii, bez zmiany jej składu chemicznego);
- 3) *procesy biologiczne* (gdy w trakcie przemian mamy do czynienia z materiążywioną).

Badania procesów źródłowych i ich ilościowego opisu pod względem jakości wody i ścieków można datować od roku 1925, poczynając od klasycznych wyników H.W. Streetera i E.B. Phelps'a [152]. Istotne uogólnienia ich prac pojawiły się dopiero w latach 60. XX wieku (np. [51]).

W syntetycznym schemacie poszczególne *procesy jednostkowe*, opisywane funkcjami źródłowymi, obrazuje rys. 4.13. Zestawiono na nim zasadnicze czynniki, warunkujące stan sanitarny wód naturalnych, oraz relacje między nimi. Rozwiązując problemy praktyczne, będziemy napotykali złożone kombinacje procesów jednostkowych, z których wiele nie zostało jeszcze do końca zbadanych. Z tego względu decyzje co do zakresu konkretnego

modelu matematycznego, opisującego jakość wody, muszą być podejmowane w ujęciu interdyscyplinarnym. Poniżej będziemy je więc omawiali tylko w niezbędnym zakresie, dążąc do sformułowania roboczych zależności, przydatnych w trakcie ilościowego opisu migracji zanieczyszczeń (patrz np. rozdz. 9).



Rys. 4.13. Schemat ideowy najważniejszych procesów źródłowych [51]

4.10.3.2. Natlenianie wody. Obecność w wodzie i ściekach rozpuszczonego tlenu warunkuje możliwość utrzymania się przy życiu organizmów aerobowych oraz przebieg wielu procesów, prowadzących do spadku stężenia zanieczyszczeń (co jest istotą *samooczyszczania wód naturalnych* oraz podstawą wielu *technicznych metod* oczyszczania wody i ścieków). Podstawowym źródłem tego gazu w interesujących nas tu sytuacjach jest jego dopływ z powietrza atmosferycznego (choć niekiedy napotkać można także systemy natleniające, dostarczające czysty tlen [155]).

Tlen, jak każdy gaz, rozpuszcza się w cieczy poprzez powierzchnię międzyfazową, toteż stopień jej rozwinięcia w zasadniczym stopniu wpływa na efektywność procesu. W ścisłym ujęciu mamy więc do czynienia z przekazywaniem masy między dwoma układami (cieczą i gazem, a konkretnie – wodą i powietrzem atmosferycznym), przez rozdzielającą te układy powierzchnię graniczną. Jeśli więc chcielibyśmy dokładnie opisać przebieg rozpuszczania się tlenu w wodzie (czy każdego innego gazu w cieczy), to musielibyśmy to uczynić, posługując się *warunkami brzegowymi* (patrz par. 4.11.4) dla równania transportu tego gazu wewnątrz cieczy (4.174) lub (4.219).

W praktyce wygodnie będzie rozróżniać dwa typy procesów napowietrzania:

- 1) o niskim stopniu rozwinięcia powierzchni międzyfazowej;
- 2) o wysokim stopniu rozwinięcia tej powierzchni.

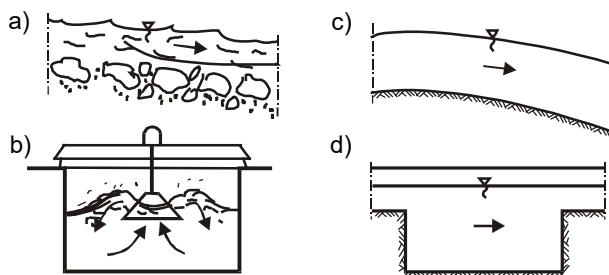
Granica między tymi umownymi kategoriami nie może być zdefiniowana w sposób jednoznaczny. Jednakże w zastosowaniach technicznych podział ten jest dość klarowny i raczej nie budzi wątpliwości. Do procesów pierwszego typu zaliczyć można wszelkie układy ze swobodną powierzchnią, zarówno zupełnie poziomą (gdy ciecz znajduje się w stanie spoczynku), jak i wyraźnie sfalowaną. Z kolei drugą kategorię tworzą układy napowietrzane sprężonym powietrzem (gdy w całej masie cieczy rozproszone są pęcherzyki powietrza) oraz układy, w których to ciecz staje się substancją rozproszoną w gazie (rozpryskiwana przez aeratory turbinowe lub systemy służące do jej rozdeszczania; do tej kategorii zaliczyć można też odskoki Bidone'a [101]).

Określenia powyższe uzupełnijmy niezależnym podziałem obiektów hydraulicznych na:

- *obiekty tranzytowe* (rzeki, kanały, rowy, rurociągi, dreny itp.);
- *obiekty kubaturowe* (zbiorniki i reaktory).

Te dwie kategorie dają razem cztery kombinacje, z których każda pojawia się w systemach ochrony środowiska i inżynierii sanitarnej, a które mają wyraźnie odrębne charakterystyki aeracyjne. Są to:

- *obiekty tranzytowe o wysokim stopniu rozwinięcia powierzchni międzyfazowej woda-powietrze* (na przykład ciekły wodny z zainstalowanym systemem rur perforowanych, dostarczających sprężone powietrze, bystrza, małe potoki górskie – rys. 4.14a);
- *obiekty kubaturowe o wysokim stopniu rozwinięcia powierzchni międzyfazowej woda-powietrze* (na przykład komory napowietrzania osadu czynnego – rys. 4.14b);
- *obiekty tranzytowe o niskim stopniu rozwinięcia powierzchni międzyfazowej* (na przykład rzeki – rys. 4.14c);
- *obiekty kubaturowe o niskim stopniu rozwinięcia powierzchni międzyfazowej* (na przykład osadniki lub zbiorniki naturalne – rys. 4.14d).



Rys. 4.14. Układy o różnej intensywności natleniania (opis w tekście)

Natlenianie wody w układach o wysokim stopniu rozwinięcia powierzchni międzyfazowej ciecz-gaz może być opisane ciągłą funkcją przestrzeni (przy założeniu, że praktycznie w każdym punkcie obszaru ciecz znajduje się w kontakcie z gazem) oraz czasu. Jest to proces I rzędu, o szybkości proporcjonalnej do *deficytu tlenowego*, toteż zgodnie z (4.224) i (4.229) możemy napisać, że *funkcja źródłowa, opisująca dopływ tlenu z atmosfery w układzie o wysokim stopniu rozwinięcia powierzchni międzyfazowej*, opisana jest następującą relacją:

$$z_{dt} = \frac{dc_t}{dt} = k_{dt}(c_{nt} - c_t). \quad (4.231)$$

W przypadku natleniania wody poprzez jej kontakt z powietrzem, stężenie nasycenia c_{nt} zależy od temperatury układu (rys. 2.6) i w przybliżeniu może być obliczone z następującego wzoru empirycznego (c_{nt} [g/m³], T [°C] [25]):

$$c_{nt} = 14,16 - 0,3943 T + 0,007714 T^2 - 0,0000646 T^3. \quad (4.232)$$

Gdy rozważamy proces natleniania wód morskich, musimy wziąć pod uwagę wpływ zasolenia S_{wm} na wartość stężenia maksymalnego. Można tu skorzystać z przybliżonej relacji empirycznej, zgodnie z którą [29]

$$c_{nt}(S_{wm}, T) = \frac{475 - 2,65 S_{wm}}{33,5 + T}, \quad (4.233)$$

gdzie S_{wm} [g/dm³], T [°C]. Rozpuszczalność tlenu w wodzie zanieczyszczonej (w ściekach) zależy od składu roztworu. W przypadku ścieków miejskich orientacyjnie można przyjmować, że wynosi ona około 95% rozpuszczalności tego gazu w czystej wodzie.

Niekiedy można napotkać systemy, w których do wody doprowadzany jest czysty tlen. Jeżeli ciecz rozpuszczająca odizolowana jest od innych gazów, wtedy jej pojemność tlenowa jest dużo wyższa (dla $T = 0^\circ\text{C}$ mamy rozpuszczalność czystego tlenu $c_{nct} = 70,0$ g/m³, zaś dla $T = 30^\circ\text{C}$ – $c_{nct} = 44,3$ g/m³) niż dla typowych systemów, w których wykorzystywane jest powietrze atmosferyczne.

Stała szybkości natleniania jest parametrem ściśle uzależnionym od konkretnej sytuacji. Co więcej, wbrew swej powszechnie używanej nazwie, może zmieniać się wewnątrz systemu. W obliczeniach inżynierskich zmienność przestrzenna jest jednak pomijana, a uwzględnia się jedynie zależność k_{dt} od temperatury i od rodzaju systemu napowietrzającego (w tym od wydatku powietrza, dostarczanego do wody lub ścieków dla systemów napowietrzania pęcherzykowego, zaś od parametrów aeratora dla systemów mechanicznych).

Wpływ temperatury może tu być ujęty prostą relacją

$$k_{dt}(T) = k_{dt}(T=20^\circ\text{C}) 1,024^{T-20}, \quad (4.234)$$

stanowiącą empiryczną wersję reguły van't Hoffa (4.223).

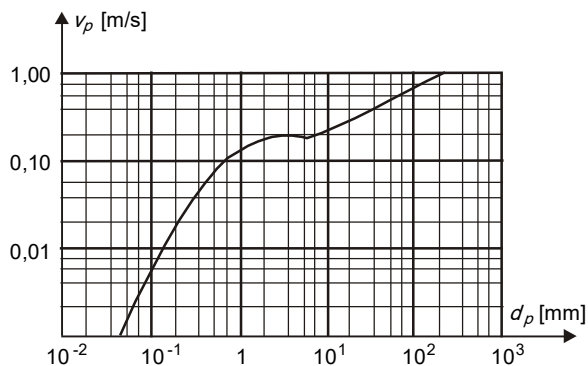
Dużo bardziej złożony jest wpływ konkretnego rozwiązania technicznego na wartość k_{dt} . W istocie rzeczą jest to czynnik indywidualny, toteż stałą szybkości natleniania *najlepiej byłoby dla każdego obiektu wyznaczać empirycznie*. Jest to jednak mało realne. Przybliżoną wartość tej stałej dla systemów pęcherzykowych można obliczyć ze wzoru [155]

$$k_{dt} [\text{godz}^{-1}] = C_{NP} \frac{\nu_p}{h_p^{1/3}} Sc^{0,5}, \quad (4.235)$$

gdzie stała empiryczna C_{NP} powinna być wyznaczona indywidualnie (orientacyjnie wartość tej stałej jest rzędu 30,0). Prędkość wypływu pęcherzyków powietrza ν_p [m/s] można na przykład odczytać z wykresu na rys. 4.15 (uprzednio wyznaczony zastępczą średnicę przeciętnego pęcherzyka). Zagłębienie systemu napowietrzającego h_p wstawiamy do ostatniej zależności w metrach, zaś *liczba Schmidta*

$$Sc = \nu D_M \quad (4.236)$$

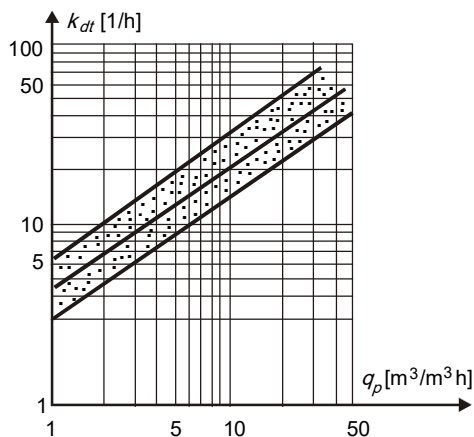
odgrywająca ogromną rolę w teorii przenoszenia masy, jest bezwymiarowa.



Rys. 4.15. Prędkość wypływu pęcherzyków powietrza w wodzie

Dokładniejsze wartości współczynnika k_{dt} można zaczerpnąć z różnego typu zestawień i charakterystyk empirycznych. Znaleźć je można w podręcznikach i poradnikach technicznych oraz w katalogach producentów. Często zamiast stałej k_{dt} podaje się tam wielkość pokrewną, zwaną *zdolnością natleniania* OC (z angielskiego terminu *oxygenation capacity*). Zachodzi między nimi prosta relacja

$$OC = c_{nt} k_{dt}. \quad (4.237)$$



Rys. 4.16. Współczynnik szybkości natleniania wody (q_p – wydatek powietrza odniesiony do jednostki objętości komory napowietrzania)

Konkretne wartości omawianego tu współczynnika uzależnione są od szczegółowych rozwiązań technicznych. Systemy służące do napowietrzania obiektów kubaturowych o wysokim stopniu rozwinięcia powierzchni międzyfazowej (rys. 4.14b), niekiedy wykorzystywane także do napowietrzania układów tranzytowych (rys. 4.14a), dzielone są na:

- urządzenia do natleniania sprężonym powietrzem:
 - drobnymi pęcherzykami,
 - średnimi pęcherzykami,
 - grubymi pęcherzykami;

— urządzenia do natleniania mechanicznego:

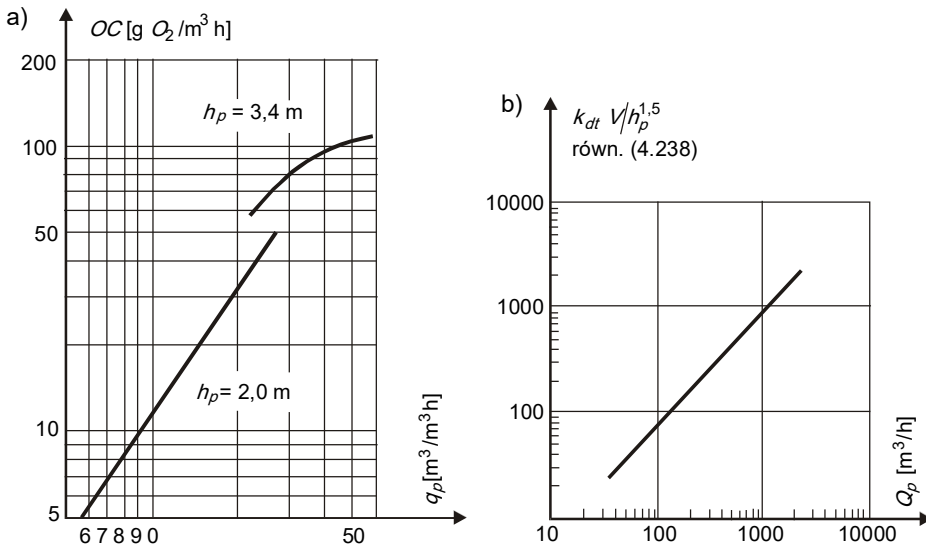
- o osi pionowej,
- o osi poziomej.

Przy *napowietrzaniu drobnopęcherzykowym* wykorzystuje się z reguły *dyfuzory z materiału porowatego*, które wytwarzają pęcherzyki powietrza o średnicach w granicach 0,5 – 5,0 mm. Przykładowe wartości współczynnika k_{dt} dla tego typu urządzeń podano na rys. 4.16.

W systemach *średniopęcherzykowych* stosuje się najczęściej rury perforowane (na przykład popularny system *INKA*), wytwarzające pęcherzyki rzędu 2,5 – 7,5 mm. Efekty natleniania dla tego przypadku przedstawiają wykresy na rys. 4.17. Relacja dla systemu *INKA* jest na tyle regularna, że może być opisana dogodnym wzorem algebraicznym (Q_p [m^3/godz], V [m^3], h_p [m], k_{dt} [godz^{-1}])

$$k_{dt} = \frac{2,19 Q_p^{1,12} h_p^{1,5}}{V} . \quad (4.238)$$

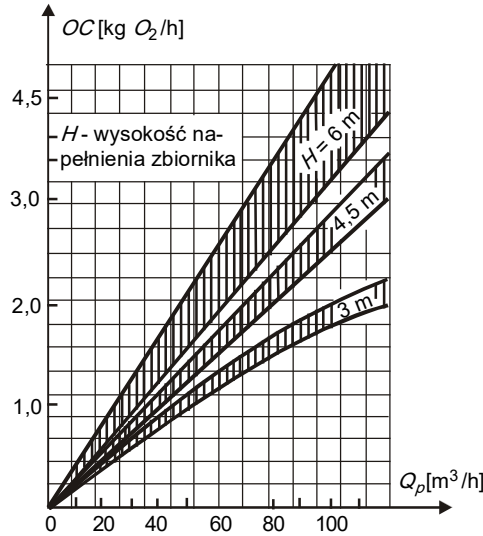
W urządzeniach do *napowietrzania grubopęcherzykowego*, mniej efektywnych od systemów omówionych poprzednio, najczęściej stosuje się wyloty powietrza w postaci krótkich odcinków pionowo usytuowanych rur (*aeratory statyczne*). Ich zdolność natleniania obrazuje rys. 4.18.



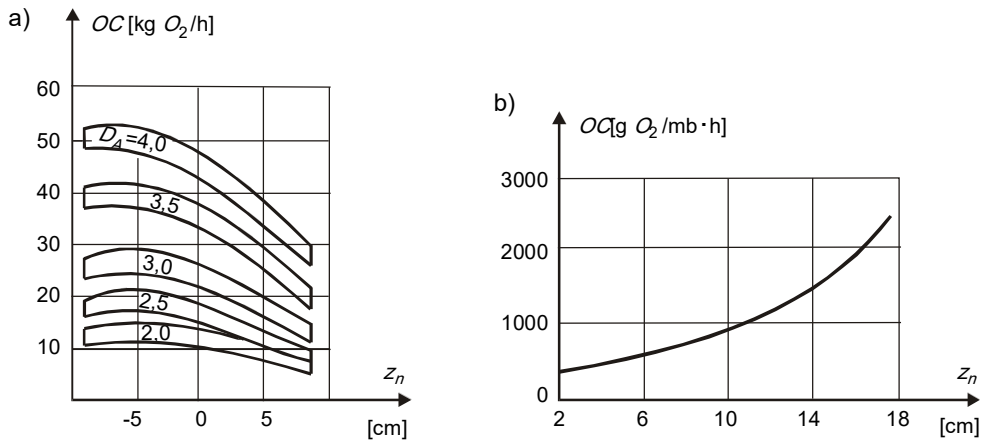
Rys. 4.17. Efektywność napowietrzania w systemach średniopęcherzykowych:
a) rury perforowane, b) system INKA)

Urządzenia do *napowietrzania mechanicznego o osi pionowej*, w skrócie zwane *aeratorami*, wytwarzane są w ogromnej liczbie odmian. Przy ich stosowaniu należy posługiwać się charakterystykami producentów. Przykładową taką charakterystykę intensywności natleniania dla jednego aeratora typu POTAP przedstawiono na rys. 4.19a.

I wreszcie ostatnia z omawianych aktualnie kategorii, *aeratory mechaniczne o osi poziomej*, najczęściej chyba jest reprezentowana przez *szcotki Kessenera*. Ich przykładową charakterystykę widać na rys. 4.19b.



Rys. 4.18. Zdolność natleniania aeratorów statycznych



Rys. 4.19. Charakterystyka aeratorów POTAP

(z_n – przesunięcie pionowe w stosunku do pozycji podstawowej, D_A – średnica aeratora) [155]

Gdy rozważany układ nie jest wyposażony w urządzenia napowietrzające, wtedy podstawowym źródłem rozpuszczonego tlenu jest jego dopływ przez swobodną powierzchnię. Jeżeli warunki wewnętrznego mieszania są niekorzystne (jak ma to miejsce w *objektach kubaturowych o niskim stopniu rozwinięcia powierzchni międzyfazowej* – rys. 4.14d), to stężenie tlenu w roztworze jest nieduże, a jego rozkład przestrzenny – zróżnicowany. Często w obiektach takich w ogóle warunki tlenowe nie są dyskutowane, gdyż służą one innym celom (na przykład sedymentacji osadu). Gdy jednak warunki te należy określić (na przykład podczas analizowania stanu sanitarnego jezior), wtedy wewnętrzną zmienność stężenia tlenu opisujemy ogólnym równaniem transportu (na przykład w postaci (4.194)), dla które-

go strumień tlenu przemieszczający się przez swobodną powierzchnię jest jednym z warunków brzegowych (patrz par. 4.11.4). Pożyteczne przy jego określaniu mogą być wartości podane w tab. 12.

Często jednak warunki ruchu wody są na tyle korzystne, że *wewnętrzne mieszanie zapewnia duże wyrównanie stężenia tlenu* w układzie. Jest to szczególnie ważne dla rzek i dla podobnych obiektów tranzytowych (rys. 4.14a, c). Średnią wartość stałej k_{dt} dla przekroju poprzecznego takiego strumienia można wtedy obliczyć ze wzorów empirycznych. W literaturze znaleźć można różne ich postacie. Do najczęściej używanych należą następujące relacje (uwaga: podane poniżej wzory, z wyjątkiem (4.241), są wymiarowo niejednorodne, toteż należy do nich podstawiać h [m], ν [m/s] oraz i_o [-], zaś wynik otrzymuje się w [d⁻¹]) [51, 110]:

— według Churchilla ($\nu = 0,55 - 1,52$ m/s, $h = 0,61 - 3,35$ m)

$$k_{dt} = 5,026 \nu^{0,969} h^{-1,673}, \quad (4.239)$$

— według Owensa i Gibbsa ($\nu = 0,03 - 0,55$ m/s, $h = 0,12 - 0,73$ m)

$$k_{dt} = 5,32 \nu^{0,67} h^{-1,85}, \quad (4.240)$$

— według Dobbinsa i O'Connora ($\nu = 0,15 - 0,49$ m/s, $h = 0,30 - 9,14$ m)

$$k_{dt} = \frac{\sqrt{D_m \nu}}{h^{3/2}} = 3,93 \nu^{0,5} h^{-1,5}. \quad (4.241)$$

Dla tych samych danych rozbieżność między trzema powyższymi relacjami jest rzędu 10%, czyli niezbyt wielka. Jednakże należy je stosować zgodnie z podanymi zakresami stosowności.

Gdy rozważamy *zbiornik nieprzepływowy* (staw, jezioro), w którym ruch wody indukowany jest wiatrem o prędkości w , wtedy można korzystać ze wzoru

$$k_{dt} = \alpha w^\beta / h \text{ [1/godz]}, \quad (4.242)$$

gdzie dla $w < 3,5$ m/s mamy $\alpha = 0,2$ i $\beta = 1,0$, zaś dla $w > 3,5$ m/s $\alpha = 0,0575$ oraz $\beta = 2,0$.

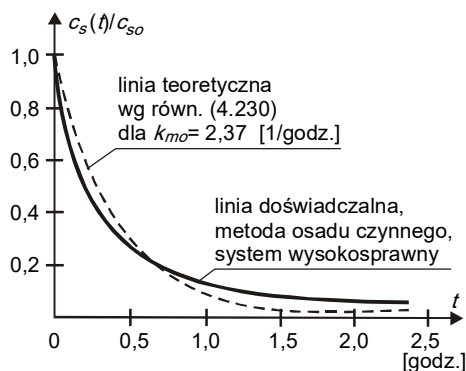
Dla *ujść rzecznych*, w których natlenianie wody jest uwarunkowane zarówno przez jej przepływ z prędkością \mathbf{v} (wywołaną naturalnym odpływem wody oraz/lub okresowym ruchem pływowym), jak i przez ruch powietrza atmosferycznego, współczynnik k_{dt} oblicza się, sumując prawe strony wzorów (4.239) oraz (4.242).

4.10.3.3. Mineralizacja substancji organicznych. Obecność w wodzie rozpuszczonego tlenu oraz odpowiednich skupisk mikroorganizmów warunkuje biochemiczną mineralizację zawartych w tej wodzie (lub ściekach) substancji organicznych. Jest to podstawowy element technicznych metod biologicznego oczyszczania ścieków oraz zachodzącego w naturze procesu *samooczyszczania wody*.

Przebieg biochemicznej mineralizacji w praktyce opisywany jest za pomocą równania reakcji I rzędu, choć należy mieć świadomość, że jest to tylko przybliżenie (uzasadnione chęcią uzyskania zapisu matematycznego w postaci na tyle prostej, aby możliwe było wyznaczanie ilościowych rozwiązań różnych problemów). *Stała szybkości utleniania* substancji organicznej k_{mo} uzależniona jest od sposobu wyrażania stężenia mineralizowanych związków. W dalszym ciągu najczęściej posługiwać się będziemy powszechnie stosowaną miarą, czyli pięciodniowym *biochemicznym zapotrzebowaniem tlenu BZT₅* (choć za lepsze miary uważa się różne rodzaje *utlenialności* lub tak zwany *całkowity węgiel organiczny TOC*).

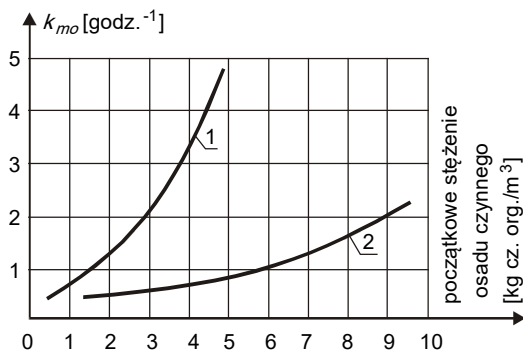
Najdokładniejszą metodą wyznaczania stałej k_{mo} dla konkretnych przypadków jest obliczenie jej z relacji typu (4.230), na podstawie uprzednio wyznaczonej krzywej doświadczalnej $c_s(t)$. Przykładowy przebieg takiej reakcji pokazuje rys. 4.20 [41]. Obliczona dla tego przypadku wartość stałej biodegradacji substancji organicznej wynosi $k_{mo} = 2,37$ [1/godz.]. Zestawienie na tym rysunku krzywej doświadczalnej i teoretycznej pozwala przy okazji zobrazować wspomnianą wcześniej rozbieżność między rzeczywistym przebiegiem procesu, a jego przebiegiem przy założeniu modelu reakcji I rzędu (równ. (4.224)).

Wyznaczając doświadczalnie wartość omawianej tu stałej należy starać się możliwie najdokładniej odtworzyć charakter interesującego nas obiektu rzeczywistego (skład chemiczny oraz charakterystyki biologiczne i fizyczne, w szczególności – rodzaje i stężenia organizmów żywych oraz typ i intensywność systemu napowietrzania), lecz w warunkach nieprzeptywowych (dla wyeliminowania wpływu nieuniknionej nierównomierności pola prędkości).



Rys. 4.20. Przykładowy przebieg mineralizacji związków organicznych

Przykładowe wartości współczynnika k_{mo} oraz jego zależność od początkowego stężenia osadu czynnego i od początkowego stężenia substancji organicznych, wyrażonego jako $ChZT$ ścieków, podano na rys. 4.21 [42]. Odnoszą się one do warunków, jakie panują na oczyszczalniach ścieków, gdzie dla zapewnienia niezbędnego stopnia redukcji zanieczyszczeń utrzymuje się wysokie stężenia osadu czynnego oraz duże intensywności napowietrzania komór reakcyjnych.



Rys. 4.21. Współczynnik szybkości utleniania związków organicznych (początkowe $ChZT$ ścieków (1) 500 mg/l; (2) 1500 mg/l)

Przy rozważaniu problemów ekologicznych bardziej interesuje nas mieszanina ścieków z wodami odbiornika, w której występują znacznie niższe niż na oczyszczalniach stężenia mikroorganizmów. Dla takiego przypadku współczynnik k_{mo} przyjmuje dużo mniejsze wartości, które w dodatku wahają się w granicach od 0,01 [1/godz] (badania na rzece Cam w Wielkiej Brytanii [51]), do 0,06 [1/godz] (badania na rzece Douze we Francji [75]). Reguła van't Hoffa dla współczynnika k_{mo} ma postać relacji

$$k_{mo}(T) = k_{mo}(T = 20^{\circ}\text{C}) 1,047^{(T-20)}. \quad (4.243)$$

4.10.3.4. Fotosynteza. Mianem *fotosyntezy* określa się zespół złożonych procesów biochemicznych, których istotą jest przyrost biomasy organizmów zielonych, z *jednoczesną produkcją tlenu*. Przebieg fotosyntezy uwarunkowany jest obecnością światła słonecznego (nie może więc ona zachodzić w nocy, ani w głębokich warstwach wody, do których nie dociera promieniowanie słoneczne) oraz pewnych związków chemicznych (głównie dwutlenku węgla jako źródła węgla oraz amoniaku i aminokwasów [105]). Związki te, w interesujących nas tu sytuacjach, najczęściej są produktami równoległe przebiegających procesów mineralizacji substancji organicznych zawartych w ściekach lub wodzie, dokonywanej przez bakterie w obecności tlenu.

Jak wynika z powyższych uwag, w wyniku fotosyntezy w wodzie wzrasta stężenie rozpuszczonego tlenu oraz stężenie biomasy (głównie glonów). Oba te elementy mogą być opisane odpowiednimi funkcjami źródłowymi, przy czym w dokładnym ujęciu należy je uwzględnić jednocześnie (pisząc osobne równanie zachowania masy (4.194) dla stężenia rozpuszczonego tlenu i osobne dla stężenia biomasy, najczęściej wyrażanego przez koncentrację chlorofilu). Dodatkową komplikację stwarza konieczność ilościowego opisu intensywności promieniowania słonecznego (która ulega trojakiemu typu zmianom – w cyklu rocznym, w cyklu dobowym oraz losowo, w związku z różnym stopniem zachmurzenia nieba), jak też stężenia substancji pokarmowych i ewentualnych inhibitorów procesu.

Pełny model matematyczny fotosyntezy jest więc bardzo złożony (np. [51]), toteż zawsze celowe jest rozważenie jego wersji uproszczonych. W dalszym ciągu tego paragrafu zajmiemy się tylko relacjami opisującymi samą produkcję tlenu (funkcja źródłowa dla przyrostu biomasy – patrz pkt 4.10.3.6).

Rozwiązaniem radykalnie upraszczającym problem byłoby oczywiście całkowite pominięcie fotosyntezy. Uzasadnieniem dla takiej decyzji byłby fakt, że produkcja tlenu przez organizmy zielone zwiększa jego stężenie w wodzie, a więc jej pominięcie daje korzystny margines bezpieczeństwa obliczeń. Jednakże przed ewentualnym odrzuceniem tego czynnika należy choćby wstępnie porównać jego udział w całkowitym bilansie tlenowym rozważanego systemu. Jest to istotne, gdyż niekiedy proces fotosyntezy jest podstawowym źródłem tego gazu (na przykład w stawach ściekowych, dla których dopływ tlenu przez swobodną powierzchnię jest znikomy). Spowodowana fotosyntezą produkcja tlenu w zbiornikach i ciekach, odniesiona do jednostki swobodnej powierzchni wody, leży w granicach

$$\begin{aligned} z_{fi} &= 1,2 - 8,5 \text{ [g } O_2/\text{m}^2 \text{ d]} \text{ dla } h < 4,0 \text{ m, oraz} \\ z_{fi} &= 0,22 - 0,76 \text{ [g } O_2/\text{m}^2 \text{ d]} \text{ dla } h < 10,0 \text{ m.} \end{aligned} \quad (4.244)$$

Jako najprostszą funkcję źródłową, opisującą rozważany tu proces, można przyjąć następującą relację:

$$\left. \begin{aligned} z_{fl}(t) &= z_{fm} \sin \left(\pi \frac{t - t_{sr}}{t_{ss} - t_{sr}} \right) && \text{dla } t_{sr} < t < t_{ss} \\ z_{fl} &= 0 && \text{dla } t_{ss} < t < t_{sr} \end{aligned} \right\} \quad (4.245)$$

(t_{sr} – czas wschodu Słońca, t_{ss} – czas zachodu Słońca). Maksymalną intensywność fotosyntezy należy wyznaczyć doświadczalnie dla rozważanego przypadku, gdyż rozrzut tej wielkości jest znaczny (patrz relacje (4.244)).

W dokładniejszym ujęciu, gdy chcemy powiązać wydzielanie tlenu z rozwojem biomasy, mamy

$$z_{fl} = p_f(t) z_{fb}. \quad (4.246)$$

Współczynnik p_f zależy od charakterystyki produkujących tlen organizmów zielonych, a jego średnia wartość leży w granicach 1,25 – 1,75. Uzależnia się go od czasu za pomocą sinusoidalnej funkcji, występującej w relacji (4.245), przyjmując jako wartość maksymalną $p_{fm} = 2,36$. Funkcję źródłową z_{fb} omówimy w punkcie 4.10.3.6.

4.10.3.5. Nitryfikacja. Zawarte w wodzie związki azotu stanowią ważny wskaźnik jej jakości. Są one między innymi substancjami pokarmowymi dla roślin, których nadmierny rozwój jest istotnym zagrożeniem dla zbiorników wodnych (*eutrofizacja*).

Związki azotu ulegają różnym przemianom, z których bardzo istotna jest *nitryfikacja*, to jest bakteryjne utlenianie azotu amonowego do azotynów (bakterie *Nitrosomonas*), a tych z kolei – do azotanów (bakterie *Nitrobacter*). W procesie tym zużywany jest tlen. Miarą ładunku utleniających związków azotu jest tak zwane *nitryfikacyjne zapotrzebowanie tlenu NZT* (analogiczne do *BZT*). Szybkość nitryfikacji zależy od stężenia tlenu (proces zanika przy jego spadku poniżej 0,2 g/m³) oraz od wielu innych czynników, których wpływ należy uwzględnić w nitryfikacyjnym modelu jakości wody. W najprostszym ujęciu można napisać, że

$$z_N = -k_N c_N. \quad (4.247)$$

Stałą szybkości nitryfikacji należy wyznaczać indywidualnie. Tytułem przykładu podajemy tu empiryczny wzór, wyprowadzony [51] dla rzeki Trent (W. Brytania), zgodnie z którym

$$k_N = -0,6272 + 0,0789 T + \frac{2,5773}{v}. \quad (4.248)$$

Temperaturę wody wstawiamy tu w [°C], prędkość przepływu wody – [km/godz], zaś współczynnik ma wymiar [doba⁻¹].

Jak widać, uwzględnienie w bilansie tlenowym zużycia tego gazu w procesach przemian azotowych wiąże się z koniecznością równoczesnego opisu stężeń przynajmniej podstawowych typów związków azotu. Modele dokładniejsze wymagają ponadto opisu stężenia mikroorganizmów, biorących udział w procesach nitryfikacyjnych.

Otrzymany układ równań staje się na tyle złożony, że przy rozważaniu procesów migracji zanieczyszczeń w środowisku naturalnym stosowany bywa rzadko [51]. Jest on natomiast bardzo ważnym elementem poprawnych metod projektowania urządzeń do oczyszczania ścieków, mających zapewnić redukcję stężenia związków azotu (które, podobnie jak i związki fosforu, zalicza się do kluczowych kryteriów jakości wody).

4.10.3.6. Przyrost i ubytek mikroorganizmów. Obecność mikroorganizmów warunkuje przebieg różnych procesów, zachodzących w wodzie. Mineralizacja substancji organicznych, fotosynteza, pobór tlenu w trakcie respiracji, nityfikacja – to tylko część zjawisk, które są konsekwencją funkcji życiowych mikroorganizmów. Ich ilościowy opis należy do najtrudniejszych elementów modelowania jakości wody, a metody takiego opisu nie są jeszcze do końca rozpoznane.

Podstawową informacją jest tu przyrost żywych mikroorganizmów (którymi mogą być wybrane gatunki bakterii, glony, plankton itp.). Z reguły zakłada się, że jest to proces opisany reakcją I rzędu, czyli że odpowiednia funkcja źródłowa ma postać

$$z_{mo} = k_{mo} c_{mo}. \quad (4.249)$$

Stała szybkości syntezy biomasy k_{mo} opisywana jest najczęściej funkcją Monoda [83]

$$k_{mo} = k_{mom} \frac{c_{si}}{K_S + c_{si}}, \quad (4.250)$$

gdzie: c_{si} – stężenie substancji biogennej, ograniczających rozwój analizowanych mikroorganizmów, K_S – stała nasycenia, odpowiadająca takiej wartości c_{mo} , przy której $k_{mo} = k_{mom}/2$, zaś k_{mom} – maksymalna wartość stałej szybkości syntezy, wyznaczana laboratoryjnie dla konkretnego przypadku.

Obok syntezy nowych organizmów, w omawianym tu bilansie należy uwzględnić także *obumieranie* żywych komórek

$$z_{ob} = -k_{ob} c_{mo}, \quad (4.251)$$

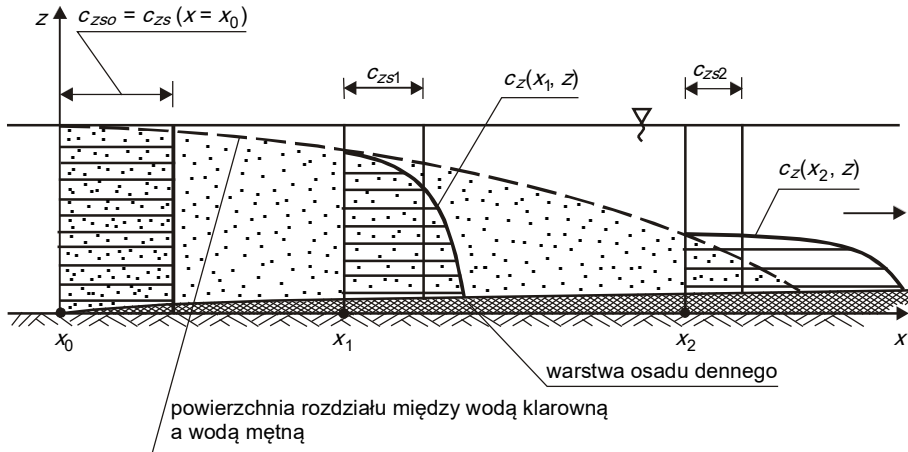
odpowiadające przyrostowi masy komórek obumarłych, z których część ulega *rozpuszczeniu* (zwiększając stężenie zanieczyszczeń, znajdujących się w roztworze), a część – *sedymentacji* (patrz pkt 4.10.3.7).

Jak widać, ilościowy bilans biomasy mikroorganizmów ma bardzo złożony charakter. Podobnie więc jak w przypadku nityfikacji, w modelach jakości wód naturalnych czynnik ten uwzględniamy bardzo rzadko (na przykład [51]). Stanowi on natomiast zasadniczy element biologicznych metod oczyszczania ścieków.

4.10.3.7. Separacja grawitacyjna. Procesy grawitacyjnego rozdziału masy dotyczą substancji zawieszonych w płynie. Gdy gęstość takiej substancji jest większa od gęstości płynu, jej cząsteczki wykazują tendencję do opadania ku dołowi (*sedymentacja*). W przeciwnym natomiast przypadku – przemieszczają się ku górze (*flotacja*). Szczegółowo procesy te omówione będą w rozdz. 13, gdyż z definicji badane są one w ramach *metody strukturalnej*. Jednakże ze względów praktycznych dość często stosuje się do ich opisu pojęcie *metody fenomenologicznej*, za pomocą odpowiedniej funkcji źródłowej. Zasadę jej wprowadzenia przedstawiono na rys. 4.22, obrazującym odcinek rzeki, w którego początkowej części płynie woda zawierająca zawieszinę o stężeniu $c_z(x < x_0, z)$, na tyle wyrównanym w pionie, że jest ono praktycznie równe wartości średniej $c_{z3}(x < x_0) = c_{z30}$. Gdy warunek ten nie jest spełniony, czyli gdy zmienność stężenia zawiesziny względem głębokości jest znaczna, omawiane teraz uproszczone podejście daje wyniki odbiegające od obserwowanych.

W efekcie sedymentacji cząsteczki zawiesziny przemieszczają się ku dołowi, a w górnej części strumienia formuje się strefa wody klarownej (jeżeli wszystkie cząstki są na tyle duże, by ulec sedymentacji – patrz podrozdz. 15.2). W strefie wody mętnej stężenie zawie-

siny ulega pionowemu zróżnicowaniu, przy czym średnia jego wartość $c_{zs}(x)$ maleje wzdłuż strumienia, bowiem część zawiesiny zostaje odłożona na dnie kanału lub zbiornika, tworząc warstwę *osadu dennego*. W ujęciu uproszczonym można powiedzieć, że ten docierający do dna osad „znika” z masy poruszającego się płynu.

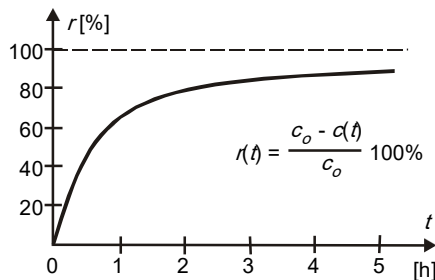


Rys. 4.22. Uśredniony opis procesu sedymentacji zawiesiny (opis w tekście)

Jak widać, zjawisko ma charakter przestrzenny, lecz jego opis uproszczony, w którym posługujemy się stężeniem uśrednionym względem poprzecznego przekroju strumienia, jest bardzo poglądowy i prosty formalnie, bowiem również tutaj można przyjąć model reakcji I rzędu, czyli napisać, że

$$z_{sg} = -k_{sg} c_{zs}. \quad (4.252)$$

Przykładowy przebieg tego procesu w czasie prezentuje wykres na rys. 4.23. Stała szybkości separacji grawitacyjnej musi być wyznaczona dla każdego przypadku indywidualnie, gdyż jest ściśle uzależniona od charakteru zawiesiny. Jej wartość leży w granicach $k_{sg} = -0,36 \div +0,36$ [1/dn], przy czym znak „plus” odpowiada grawitacyjnemu usuwaniu zawiesiny (sedymentacji lub flotacji), zaś znak „minus” – powrotnemu unoszeniu jej cząstek przez płyn (gdy jego prędkość wzrośnie powyżej granicy, umożliwiającej separację – patrz podrozdz. 15.2).



Rys. 4.23. Przykładowa krzywa efektywności sedymentacji zawiesiny ściekowej

4.10.3.8. Adsorpcja. Termin *adsorpcja* określa zjawisko, polegające na tym, że stężenie substancji na granicy dwóch faz jest większe (adsorpcja dodatnia) lub mniejsze (adsorpcja ujemna) niż w głębi fazy. Głównymi tego przyczynami są albo siły międzycząsteczkowe (*adsorpcja fizyczna*), albo wiązania chemiczne (*chemisorpcja*). Intensywność tego zjawiska w pierwszym rzędzie zależy od rodzaju kontaktujących się substancji. W niektórych przypadkach jest ona na tyle duża, że ma ogromne znaczenie praktyczne. Dotyczy to głównie procesów przemysłowych. W oczyszczaniu wody i ścieków szczególne znaczenie ma *adsorpcja jonowymienna* (gdy powierzchnia adsorbentu, zwanego *jonitem*, pochłania wybrane jony z otaczającego go roztworu, przekazując do fazy ciekłej inne jony).

W interesujących nas tu zagadnieniach celowość uwzględniania procesu adsorpcji pewnych substancji zanieczyszczających wodę można rozważać podczas przepływu wody przez ośrodek porowaty, gdy wysoki stopień rozwinięcia powierzchni międzyfazowej pozwala spodziewać się zauważalnych zmian stężenia tej substancji w roztworze.

Uwzględniając w konkretnym przypadku adsorpcję należy rozważyć, czy ma ona charakter *odwracalny* (stężenie adsorbentu na powierzchni adsorbentu rośnie wtedy do pewnego stanu nasycenia, gdy jego stężenie w roztworze jest odpowiednio wysokie, a maleje wskutek *desorpcji* gdy stężenie adsorbentu w roztworze jest niskie), czy też *nieodwracalny* (gdy obserwujemy jedynie zatrzymywanie adsorbentu przez adsorbent).

Masę i -tego adsorbentu M_{ai} , zatrzymaną przez jednostkę masy adsorbentu, najczęściej opisuje się równaniem *izotermi Freundlicha* [90]

$$M_{ai} = K_{FR} c_i^{1/n}, \quad (4.253)$$

lub równaniem *izotermi Langmuira*

$$M_{ai} = \frac{M_{a \max} b_L c_i}{1 + b_L c_i}, \quad (4.254)$$

gdzie K_{FR} , $M_{a \max}$ oraz b_L są parametrami, wyznaczanymi indywidualnie dla rozważanej substancji.

Odniesiona do jednostki czasu intensywność procesu adsorpcji i -tej substancji, czyli funkcja źródłowa tego procesu, ma najczęściej charakter liniowej relacji [96, 108]

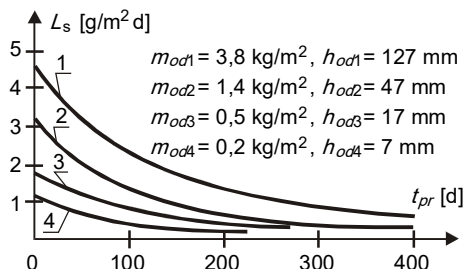
$$z_{adi} = k_{adi} (c_i - c_{adi}), \quad (4.255)$$

gdzie c_{adi} jest stężeniem tej substancji w adsorbencie.

4.10.3.9. Pobór tlenu przez osady dennie. Jeżeli na dnie strumienia zalega warstwa osadu aktywnego biologicznie oraz/lub chemicznie, wtedy przez jej powierzchnię może następować pobór tlenu rozpuszczonego w wodzie. Podobnie jak to miało miejsce w przypadku rozpuszczania tlenu z atmosfery (a w istocie rzeczy także w przypadku separacji grawitacyjnej), jest to proces powierzchniowy, wymagający w pełnym ujęciu opisu trójwymiarowego. Jednak w praktyce również tutaj wygodne może być wprowadzenie modelu uśrednionego względem przekroju poprzecznego (dla strumieni) lub względem głębokości warstwy płynu (dla zbiorników). Pobór tlenu przez osady dennie nabiera wtedy charakteru funkcji źródłowej. Jak pokazują obserwacje, tym razem jest to przemiana zerowego rzędu, opisana relacją

$$z_{od} = L_{od}/h. \quad (4.256)$$

Doświadczalnie wyznaczone wartości zużycia tlenu na jednostkę powierzchni dna rzeki lub zbiornika L_{od} przedstawiono na wykresach rys. 4.24.



Rys. 4.24. Jednostkowe zużycie tlenu przez osady dennie (m_{od} – masa osadów na jednostkę powierzchni dna; h_{od} – grubość warstwy osadu dennego; t_{pr} – czas zalegania osadu na dnie)

4.10.3.10. Inne funkcje źródłowe. Dotychczas omówione przypadki pozwalają zauważyć, że ilościowy opis funkcji źródłowych został względnie dokładnie zbadany tylko dla nielicznych przypadków (głównie chodzi tu o napowietrzanie wody oraz mineralizację związków organicznych). Dla pozostałych procesów dysponujemy jedynie bardzo uproszczonymi lub wręcz ogólnymi relacjami, zawierającymi bardzo trudne do wyznaczenia stałe empiryczne. Tak więc należy stwierdzić, że problem ilościowego opisu wielu funkcji źródłowych jest nadal otwarty. Niemniej, funkcje przedstawione w niniejszym paragrafie z jednej strony całkowicie wystarczają do zilustrowania metodyki ilościowego modelowania reakcji i przemian, wpływających na jakość wody, a z drugiej – dają możliwość konstruowania całkiem dokładnych i ważnych praktycznie modeli (patrz rozdz. 9).

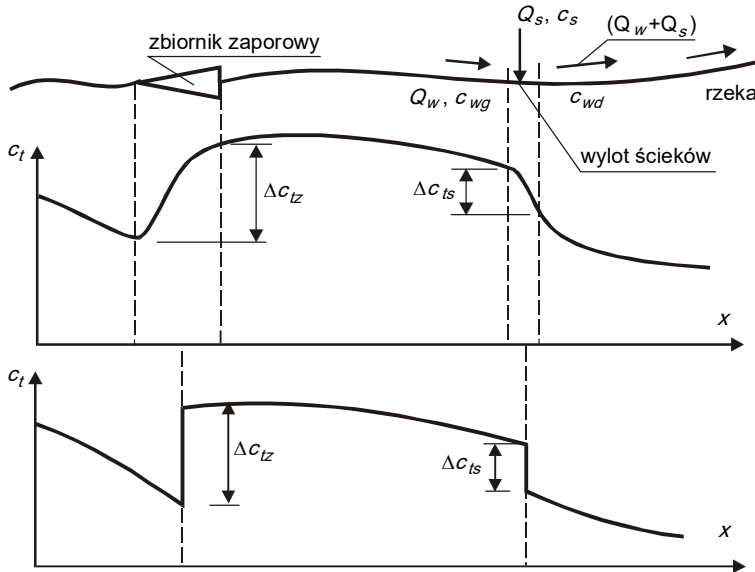
4.10.3.11. Źródła punktowe. Intensywność oddziaływania czynników źródłowych może być różna w różnych częściach rozważanego układu, i to niekiedy bardzo wyraźnie. Jest to szczególnie istotne w układach jednowymiarowych (w rzekach). Bardzo często można bieg takiego cieku podzielić na dwa typy podobszarów – długie odcinki tranzytowe, wzdłuż których zasadnicze funkcje źródłowe można uśrednić względem przekroju poprzecznego strumienia, oraz stosunkowo krótkie odcinki o znacznym stopniu przestrzennego zróżnicowania tych funkcji i ich dużej efektywności. Te lokalne efekty wywoływane są najczęściej budowlami hydrotechnicznymi i inżynierskimi (jazy, zapory, elektrownie wodne, śluzy, mosty itp.) oraz miejscowymi dopływami (ujścia bocznych rzek, wyloty kanalizacyjne, wyloty pompowni melioracyjnych itp.).

W dokładniejszym ujęciu zjawiska takie należy rozważać jako trójwymiarowe i oddzielnie modelować poszczególne typy podobszarów. Jednak przy rozwiązywaniu problemów technicznych często traktujemy te lokalne układy jako punktowe, zastępując bardzo szybkie (lecz opisane funkcjami ciągłymi) zmiany wielkości fizycznych przez nagłe zmiany skokowe (a tym samym nieciągłe). Zasadę tę ilustruje rys. 4.25.

Szczególne znaczenie ma tu lokalna intensyfikacja procesu natleniania wody. Do jej ilościowego opisu, w przypadku budowli piętrzących, można stosować następujący wzór:

$$D_G/D_D = 1 + 0,36 w_z C_{np} (1 + 0,046 T) H_{sp}, \quad (4.257)$$

gdzie: D_G , D_D – deficyt tlenowy w górnym (indeks G) i dolnym (indeks D) przekroju cieku (relacja (4.229)); $w_z = 1,25$ dla wody czystej, $w_z = 1,00$ dla wody zanieczyszczonej, $w_z = 0,80$ dla ścieków; współczynnik $C_{np} = 1,00$ dla pojedynczego przelewu oraz $C_{np} = 1,30$ dla kaskady przelewów; H_{sp} – różnica poziomów wody przed i za budowlą, wyrażona w metrach.



Rys. 4.25. Model źródła punktowego, obrazujący wzrost stężenia rozpuszczonego tlenu wskutek działania przelewu zaporę oraz spadek stężenia tlenu wskutek dopływu ścieków

Nieco bardziej uniwersalna jest zależność

$$c_{tD} - c_{tG} = K_n \rho g H_{sp} D_G / c_{nt}. \quad (4.258)$$

Współczynnik natleniania K_n określa masę tlenu rozpuszczonego w wodzie, przypadającą na jednostkę energii wody. Jeżeli nie mamy możliwości jego indywidualnego pomiaru, można orientacyjnie przyjmować dla:

- przelewu zupełnego $K_n = 0,6 \text{ kg O}_2/\text{kWh}$,
- kaskady przelewów $K_n = 1,5 \text{ kg O}_2/\text{kWh}$,
- jazów $K_n = 0,4 \text{ kg O}_2/\text{kWh}$.

Drugim typem funkcji źródłowej, którą często traktujemy jako punktową, jest zmiana (wzrost lub spadek) stężenia i -tej substancji rozpuszczonej wskutek mieszania wód odbiornika z wodami strumienia dopływającego. Odbywa się ono na pewnym odcinku, zwanym *strefą mieszania*, która niekiedy ma duże znaczenie (patrz par. 6.5.3). Gdy jednak decydujemy się na sprowadzenie jej do punktu, wtedy z oczywistego bilansu masy (rys. 4.25)

$$Q_w c_{wgi} + Q_s c_{si} = (Q_w + Q_s) c_{wdi} \quad (4.259)$$

otrzymamy stężenie w przekroju dolnym

$$c_{wdi} = \frac{Q_w c_{wgi} + Q_s c_{si}}{Q_w + Q_s}. \quad (4.260)$$

4.11. Formułowanie zagadnień

4.11.1. Wprowadzenie

Rozwiązywanie konkretnych problemów technicznych (w szczególności związanych z omawianymi tu procesami migracji zanieczyszczeń) musi być poprzedzone *sformulowaniem zagadnienia*, stanowiącego *model matematyczny* rozważanego problemu. Zagadnienie takie składa się z trzech następujących elementów:

- 1) zamkniętego układu równań fizyki matematycznej (najczęściej – różniczkowych cząstkowych);
- 2) geometrycznej charakterystyki układu fizycznego, obszaru całkowania, dla którego poszukujemy rozwiązania, wraz z informacjami o jego własnościach;
- 3) *warunków granicznych*, na które w ogólnym przypadku składają się *warunki początkowe* oraz *warunki brzegowe*.

Pierwszy z tych elementów został szczegółowo omówiony w podrozdziałach 4.1 – 4.8, a interesujące nas równania zostały dodatkowo wyprowadzone w sposób uproszczony w podrozdziale 4.9. Obecnie omówimy dwa pozostałe elementy kompletnego zagadnienia fizyki matematycznej.

4.11.2. Układ i jego własności

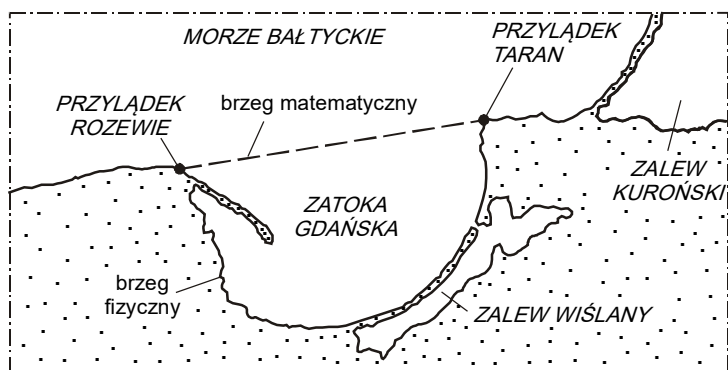
Mianem *układu fizycznego* określamy *obiekt* (lub zespół takich obiektów), wydzielony z *otoczenia*, które z kolei jest utworzone z obiektów nienależących do tego układu. O wewnętrznej strukturze interesujących nas tu układów fizycznych mówiliśmy w par. 2.1.8. Cechujące te układy własności przedstawiliśmy w rozdz. 2. Teraz zajmiemy się więc *geometryczną charakterystyką układu fizycznego*.

Realne układy, których badanie będziemy tu podejmować, mają charakter *trójwymiarowy* oraz *ograniczony*. Tym samym *granicę* oddzielającą układ od otoczenia stanowi zamknięta powierzchnia, zwana też *brzegiem obszaru* Γ .

Granica taka może być wyznaczona przez rzeczywiście istniejące powierzchnie materialne, a wtedy nazywamy ją *brzegiem fizycznym* (np. łożysko rzeki, dno morza, swobodna powierzchnia wody, kadłub statku lub samolotu, ścianka zbiornika). Jednakże rozważanie układów wyznaczonych tylko przez swe granice fizyczne bywa kłopotliwe, głównie ze względu na rozmiary takich układów. Często bowiem interesuje nas tylko lokalny przebieg zjawiska, ograniczony do pewnej części całego obszaru, której rozmiary są małe w porównaniu ze skalą całości.

W takim przypadku możemy oddzielić interesującą nas część obszaru od reszty pewną niematerialną powierzchnią, zwaną *brzegiem matematycznym*. Zasadę postępowania ilustruje rys. 4.26, na którym pokazano, jak brzeg matematyczny oddziela Zatokę Gdańską od Morza Bałtyckiego.

Brzeg obszaru może wykazywać różne cechy. Gdy nie zmienia on swego kształtu, mówimy o *brzegu sztywnym* (np. falochron), zaś w przeciwnym razie — o *brzegu odkształcalnym* (np. ulegające erozji dno rzeki). Niezależnie od powyższego, brzeg taki może być *ruchomy* (np. kadłub płynącego statku) lub *nieruchomy* (np. dno betonowego zbiornika, otaczającego fontannę). Materiał tworzący brzeg może umożliwiać przepływ płynu (*brzeg przepuszczalny* – np. utworzony z materiału porowatego) lub też nie (*brzeg nieprzepuszczalny* – np. utworzony z blachy stalowej).



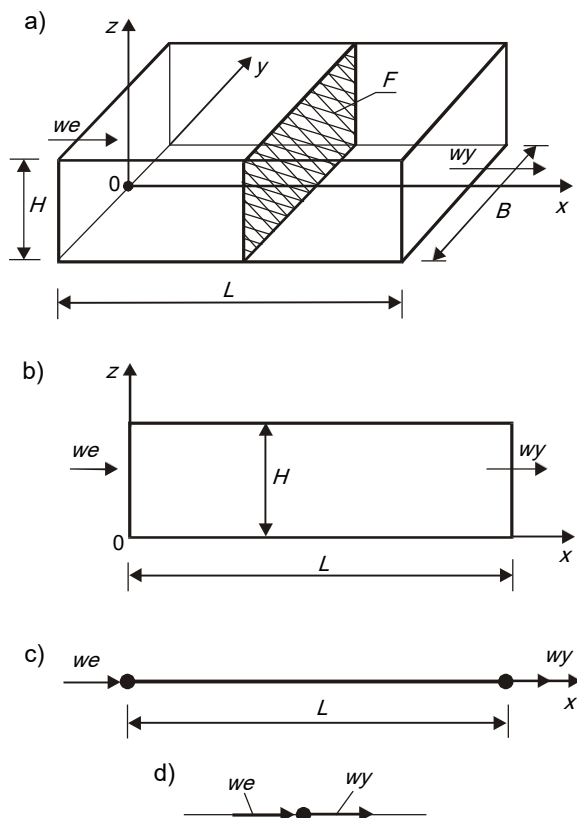
Rys. 4.26. Brzeg fizyczny i brzeg matematyczny

Cztery wymienione powyżej klasyfikacje są od siebie niezależne, toteż razem tworzą 16 różnych kombinacji (np. brzeg fizyczny, sztywny, ruchomy i nieprzepuszczalny – kadłub pływającego statku, albo też brzeg matematyczny, sztywny, nieruchomy i przepuszczalny – wodna granica Zatoki Gdańskiej na rys. 4.26). Co prawda niektóre z tych kombinacji mogą mieć sens co najwyżej formalny i trudno byłoby dla nich znaleźć przykłady praktyczne, ale omówione powyżej klasyfikacje ułatwiają pracę na etapie formułowania zagadnienia.

W ogólnym przypadku każdy układ ma charakter *przestrzenny* (lub *trójwymiarowy*, co zwyczajowo oznacza się symbolem 3D). Jednakże w zastosowaniach często posługujemy się modelami uproszczonymi pod względem kinematycznym oraz/lub geometrycznym, rozważając układy *dwuwymiarowe* (potocznie zwane *plaskimi*, choć nie w każdym układzie współrzędnych mają one kształt figury płaskiej; oznacza się je symbolem 2D) oraz układy *jednowymiarowe* (1D), bądź wręcz pozbawione wymiarów, czyli *punktowe* (gdy rzeczywisty obiekt sprowadzamy do punktu; oznaczmy je symbolem 0D). Granicami tych układów są wtedy odpowiednio *linia zamknięta* (dla systemów 2D) oraz *para punktów* (dla systemów 1D).

Jak już wspomniano, realne układy najczęściej są *ograniczone*. Jednak niejednokrotnie (gdy przynajmniej część układu ma bardzo znaczne rozmiary) wygodnie jest operować pojęciem *układu nieograniczonego* (stanowi go *przestrzeń* w przypadku trójwymiarowym, *płaszczyzna* w przypadku dwuwymiarowym i *prosta* w przypadku jednowymiarowym) lub pojęciem *układu częściowo ograniczonego* (na przykład półprzestrzeń, zewnątrz kuli, półpłaszczyzna, półprosta). Modele takie są szczególnie wygodne wtedy, gdy rozważane równania można rozwiązywać analitycznie (patrz na przykład pkt 4.12.2.3). Z natury rzeczy nie jest możliwe ich stosowanie wtedy, gdy rozwiązanie uzyskujemy metodami numerycznymi, wykonując obliczenia przy pomocy komputerów (jest to kwestia ograniczenia ich pamięci).

Stosując modele o uproszczonej charakterystyce geometrycznej musimy pamiętać o zapewnieniu powiązań obliczeniowych pomiędzy rzeczywistymi wymiarami trójwymiarowego obiektu, a jego opisem uproszczonym. Problem ten sygnalizuje rys. 4.27, pokazujący schematyczną sekwencję modeli 3D, 2D, 1D oraz 0D.



Rys. 4.27. Możliwości geometrycznego uproszczenia układów fizycznych (a – schemat układu 3D, b – schemat układu 2D, c – schemat układu 1D, d – schemat układu 0D; w_e – czynniki wejściowe, w_y – czynniki wyjściowe)

Przy rozważaniu problemów migracji zanieczyszczeń (w środowisku naturalnym oraz w obiektach technicznych) brzeg obszaru najczęściej będzie można przydzielić do jednej z następujących trzech kategorii:

- 1) *brzeg „dopływowy”*, określony przez końcowe przekroje strumieni, doprowadzających płyn do rozważanego obszaru (np. przekrój końcowy wylotu ścieków do rzeki, przekrój wylotowy komina itp.; przekroje tego typu potocznie określa się mianem *wejścia do układu* – patrz „ w_e ” na rys. 4.27);
- 2) *brzeg „odpływowy”*, określony przez początkowe przekroje strumieni wypływających z układu (np. przekrój końcowy zbiornika zaporowego; jest to *wyjście z układu* – „ w_y ” na rys. 4.27);
- 3) *brzeg nieprzepuszczalny* (pozostałe powierzchnie graniczne obszaru, przez które płyn nie może się przemieszczać, jak np. dno i ścianki boczne zbiorników i kanałów).

Zaznaczmy, że nie w każdym układzie zawsze muszą występować wszystkie trzy typy powierzchni granicznych (np. w zbiornikach odparowujących mamy tylko brzeg dopływowy oraz brzeg nieprzepuszczalny; dla substancji rozpuszczonych brak jest tu brzegu odpływo-

wego, toteż są one kumulowane w zbiorniku, podczas gdy płyn nośny opuszcza zbiornik parując ze swobodnej powierzchni).

4.11.3. Warunki początkowe

Warunki początkowe muszą być sformułowane dla tych równań różniczkowych zwyczajnych, które dotyczą procesów *nieustalonych* (zmiennych w czasie). Opisują one stan układu w chwili początkowej $t = t_0$ (najczęściej dogodnie jest przyjąć $t_0 = 0$, choć nie zawsze). W rozważanych tu zagadnieniach stan ten określony jest przez stężenie i -tej substancji rozpuszczonej c_i oraz/lub temperaturę układu T , toteż ogólna postać warunków początkowych może być zapisana następująco:

$$c_{i0}(x, y, z) = c_i(x, y, z, t = t_0), \quad (4.261)$$

$$T_0(x, y, z) = T(x, y, z, t = t_0). \quad (4.262)$$

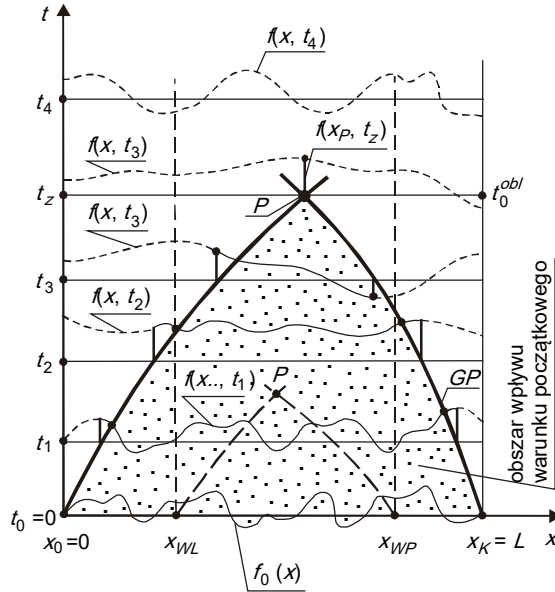
Dla modeli prostszych liczba zmiennych przestrzennych jest odpowiednio mniejsza (równa dwa dla modeli 2D oraz jeden dla modeli 1D).

Pod względem formalnym warunek początkowy jest pojęciem prostym – określa on stan wyjściowy układu, którego czasową ewolucję mamy zamiar opisać. Sformułowanie tego warunku nie sprawia trudności w sytuacjach, gdy interesuje nas migracja zanieczyszczeń wprowadzonych do obszaru, w którym rozważane składniki (lub energia cieplna) rozprzestrzenione są bardzo równomiernie. Przykładem takiej sytuacji może być awaryjny zrzut zanieczyszczeń do zbiornika, wypełnionego względnie czystą wodą. Możemy wtedy jako warunek początkowy przyjąć stałą wartość (stężenie „tła” oraz/lub temperatura „tła”). Gdy dany składnik nie występuje w odbiorniku, stężenie tła równe jest zero.

Jednakże określenie warunku początkowego często jest bardzo trudne. W szczególności wtedy, gdy rozważane układy ulegają ciągłym przemianom, a zasoby danych archiwalnych nie umożliwiają dostatecznie dokładnego opisu stanów przeszłych, dającego szansę na sformułowanie rozważanego tu warunku. Jest to sytuacja typowa dla zagadnień ochrony środowiska, gdy rozważamy migrację zanieczyszczeń w tak dynamicznych obszarach, jak oceany, morza, rzeki, czy atmosfera ziemiska.

Powszechnie wykorzystuje się wtedy możliwość przybliżonego stawiania warunku (par. 4.4.1) początkowego, uzasadnioną przez tak zwaną *zasadę zanikającej pamięci układu fizycznego*. Obrazuje ją schemat na rys. 4.28, dla równania hiperbolicznego, w przypadku jednowymiarowym. Nieregularne linie reprezentują tam wykresy funkcji $f(x, t)$ dla kolejnych wartości czasu, od $t = 0$ (warunek początkowy) do $t = t_4$, przy czym linią ciągłą zaznaczono te części wykresu, których przebieg jest uzależniony od warunku początkowego, zaś linią przerywaną – odcinki funkcji zależne ponadto od warunków brzegowych (par. 4.11.4). Granice między tymi dwoma typami obszarów zaznaczono na rys. 4.28 liniami GL i GP. Jak widać tam, *obszar wpływu warunku początkowego* z upływem czasu ulega zawężeniu, aż redukuje się do punktu P, wyznaczającego *czas retardacji* t_z . W ujęciu potocznym można rzec, iż po upływie czasu t_z układ „zapomina” kształt warunku początkowego.

Dowód tego stwierdzenia wymaga porównania pewnej liczby rozwiązań równania transportu (4.219) lub (4.221), otrzymanych dla tych samych warunków brzegowych, lecz dla różnych warunków początkowych. Sposoby rozwiązywania tych równań omówione zostaną w podrozdziale 4.12.



Rys. 4.28. Ilustracja „zasady zanikającej pamięci” dla równania hiperbolicznego (opis w tekście)

Omówiony powyżej fakt stopniowego „zapominania” przez układ stanów ubiegłych wykorzystuje się w praktyce w ten sposób, że jako początkowy czas wiarygodnych obliczeń przyjmujemy

$$t_0^{\text{obl}} = t_0 + t_z \quad (4.263)$$

(gdy $t_0 = 0$, to oczywiście wyniki obliczeń traktujemy jako poprawne od chwili $t_0^{\text{obl}} = t_z$), zaś warunek początkowy zakładamy w zasadzie dowolnie. W zasadzie, gdyż staramy się, aby był on możliwie bliski warunkom rzeczywistym. Szczególnie często jako warunek ten przyjmuje się dla danego układu rozwiązanie dla ruchu ustalonego, jednostajnego lub niejednostajnego.

4.11.4. Warunki brzegowe

4.11.4.1. Sformułowanie ogólne. Mianem *warunków brzegowych* określamy relacje matematyczne, które muszą być spełnione przez szukaną funkcję (lub kilka takich funkcji) na brzegu obszaru, w którym poszukujemy rozwiązania. Sposób postawienia tych warunków uzależniony jest od typu równania lub układu równań, opisujących rozważane zjawisko. Mogą to być równania *eliptyczne*, *hiperboliczne* lub *paraboliczne*, albo też równania o charakterze mieszanym [43, 67, 147].

W przypadku ogólnym, gdy transport substancji rozproszonej oraz/lub energii cieplnej wpływa na ruch płynu, mamy do czynienia ze złożonym układem zależności matematycznych (na przykład równania (4.174) – (4.178), lub ich formy uproszczone). Warunki brzegowe dla równań zachowania masy i pędu roztworu należy wtedy formułować w sposób omawiany w podręcznikach mechaniki płynów (np. [101]). Tutaj zajmiemy się więc tylko równaniami zachowania masy substancji rozpuszczonych (4.174) oraz energii (4.177).

Zgodnie z zasadami klasyfikacji są to *równania paraboliczne* (a ściślej – *paraboliczno-eliptyczne* [57]), toteż warunki brzegowe należy dla nich zadawać tak, aby w każdym

punkcie brzegu Γ obszaru, w którym jest określone rozwiązanie, znana była *jedna informacja* o każdej z szukanych w tym obszarze funkcji, przy czym informacje te mogą mieć jedną z trzech następujących postaci:

- 1) *warunek Dirichleta*, określający w danym punkcie P brzegu Γ wartości każdej z szukanych funkcji, zmienny w czasie dla zjawisk niestabilnych:

$$c_{ib}(t) = c_i(P, t); \quad T_b(t) = T(P, t), \quad (4.264)$$

lub niezależny od czasu dla zjawisk ustalonych:

$$c_{ib}(P) = c_i(P); \quad T_b = T(P); \quad (4.265)$$

- 2) *warunek Neumanna*, określający w punkcie P pochodną szukanej funkcji w kierunku normalnym do brzegu Γ , zmienną w czasie dla zjawisk niestabilnych:

$$\left(\frac{\partial c_i}{\partial n} \right)_P = g_{Nc}(P, t); \quad \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_P = g_{NT}(P, t) \quad (4.266)$$

lub niezależną od czasu dla zjawisk ustalonych:

$$\left(\frac{\partial c_i}{\partial n} \right)_P = h_{Nc}(P); \quad \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_P = h_{NT}(P), \quad (4.267)$$

przy czym funkcje, występujące po prawych stronach powyższych relacji, są z góry znane;

- 3) *warunek Hankela*, określający w punkcie P związek pomiędzy wartością szukanej funkcji oraz jej pochodną normalną, będący funkcją czasu dla zjawisk niestabilnych:

$$g_c \left(c_i, \frac{\partial c_i}{\partial n} \right)_P = g_{Hc}(P, t), \quad g_T \left(T, \frac{\partial T}{\partial n} \right)_P = g_{HT}(P, t) \quad (4.268)$$

lub niezależny od czasu dla zjawisk ustalonych:

$$h_c \left(c_i, \frac{\partial c_i}{\partial n} \right)_P = h_{Hc}(t), \quad h_T \left(T, \frac{\partial T}{\partial n} \right)_P = h_{HT}(t), \quad (4.269)$$

gdzie g_{Hc} , g_{HT} , h_{Hc} oraz h_{HT} są z góry danymi funkcjami.

Omówione powyżej typy informacji można zestawiać na cztery następujące sposoby:

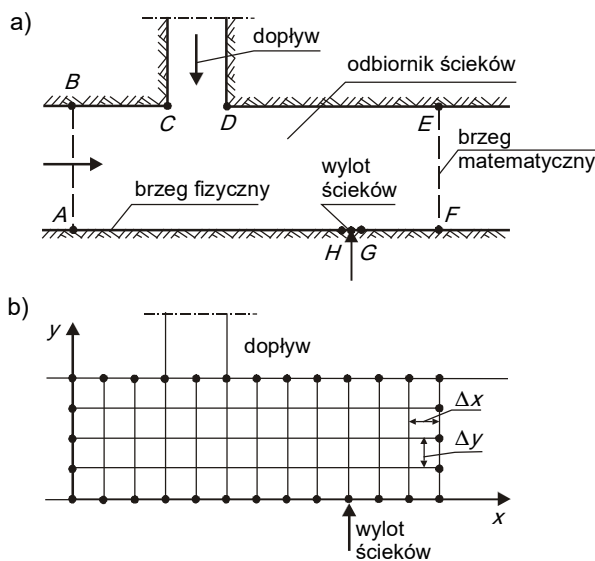
- 1) *zagadnienie brzegowe Dirichleta (zagadnienie brzegowe pierwszego rodzaju)* – gdy w każdym punkcie brzegu zadany jest tylko warunek Dirichleta;
- 2) *zagadnienie brzegowe Neumanna (zagadnienie brzegowe drugiego rodzaju)* – gdy w każdym punkcie brzegu zadany jest tylko warunek Neumanna;
- 3) *zagadnienie brzegowe Hankela (zagadnienie brzegowe trzeciego rodzaju)* – gdy w każdym punkcie brzegu zadany jest tylko warunek Hankela;
- 4) *zagadnienie brzegowe mieszane* – gdy na różnych częściach brzegu zadane są różne typy warunku brzegowego.

Warunki brzegowe (jak również początkowe) muszą być postawione w sposób *poprawny*. Nie będziemy jednak bliżej analizowali tego pojęcia (odsyłając zainteresowanych Czytelników do literatury specjalistycznej, np. [43]), bowiem na szczęście zagadnienia fizyki matematycznej (a więc również problemy migracji zanieczyszczeń) z reguły można postawić poprawnie [57].

Postać i charakter warunków brzegowych omówiono powyżej w ujęciu teoretycznym. W praktyce mogą one być realizowane w różnych wersjach, stosownie do indywidualnych cech rozważanego zagadnienia. Ze względu na możliwą różnorodność sytuacji, nie sposób dokonać ich wyczerpującego zestawienia. W dalszym ciągu omówimy więc poszczególne przypadki, typowe dla procesów migracji zanieczyszczeń.

4.11.4.2. Praktyczne określanie warunku Dirichleta. Warunek tej postaci jest bardzo wygodny i korzystny ze względu na proces rozwiązywania równań różniczkowych. Najczęściej możemy go sformułować wtedy, gdy do rozważanego układu dopływa strumień płynu o znacznym stężeniu substancji rozproszonych oraz/lub o wysokiej temperaturze. Typową sytuację obrazuje rys. 4.29a (dla czytelności przyjęto tam obszar dwuwymiarowy). Widać na nim rzekę, do której uchodzi mniejszy strumień oraz wylot ścieków. Warunek brzegowy możemy tu zadać wzdłuż „dopływowych” części brzegu (odcinki AB, CD oraz GH), gdzie znamy stężenie oraz/albo temperaturę cieczy. Odpowiednio należy też sformułować warunki na pozostałych częściach tego brzegu.

Zaznaczmy tu, że ze względu na powszechne stosowanie do rozwiązywania równań różniczkowych metod numerycznych (patrz par. 4.12.4), warunki brzegowe często określa się bezpośrednio dla schematów różnicowych. Poszczególным węzłom obliczeniowym przyporządkowuje się wartości brzegowe. Liczba tych węzłów zależy od wymiarów układu oraz od rozmiarów oczek siatki obliczeniowej. W przypadku pokazanym przykładowo na rys. 4.29b, wylot ścieków symbolizuje tylko jeden węzeł, dopływ boczny – 3 węzły, zaś początkowy przekrój strumienia – 5 węzłów.



Rys. 4.29. Ilustracja warunku brzegowego Dirichleta

Druga grupa zagadnień, dla których możemy określić warunek Dirichleta, obejmuje takie przypadki, gdy wypełniający obszar płyn kontaktuje się (poprzez cały brzeg, lub tylko poprzez jego część) z układem zewnętrznym, mogącym wpływać na stężenie substancji rozproszonych oraz/lub na temperaturę tego płynu. Czytelnym przykładem jest swobodna powierzchnia wody, poprzez którą styka się ona z powietrzem atmosferycznym. Najbardziej interesować nas wtedy

będzie proces rozpuszczania tlenu w wodzie (patrz pkt 4.10.3.2). Jego stężenie na swobodnej powierzchni będzie wypadkową prędkości rozpuszczania cząstek tego gazu w wodzie oraz prędkości odprowadzania jego cząsteczek w głąb cieczy (która obrazowo bywa nazywana „prędkością odnowy powierzchni międzyfazowej” [155]). Gdy ta ostatnia jest niewielka, wtedy praktycznie przyjmuje się, że na swobodnej powierzchni panuje stężenie nasycenia, czyli

$$c_b = c_{nt}(T, p) \quad (4.270)$$

(patrz wzór (4.232)). Model taki możemy stosować dla systemów naturalnych, szczególnie w stanach ustalonych. Nie jest on natomiast poprawny w urządzeniach do oczyszczania wody i ścieków, wyposażonych w systemy napowietrzające, które wywołują intensywne mieszanie zawartości komory. W takich sytuacjach powierzchniowe stężenie gazu nie jest znane, wobec czego zamiast określania warunku Dirichleta należy szukać możliwości postawienia warunku Neumanna lub Hankela.

Jako kolejne przykłady rozważanych tu procesów można wymienić kontakt płynu z warstwą osadów dennych, które wymuszają określone stężenia występujących w nich substancji (np. zerowe stężenie tlenu na powierzchni dna, pokrytej warstwą osadu zagniwającego) lub temperaturę (np. kontakt cyrkulującego w pomieszczeniu powietrza z powierzchnią grzejnika).

Pewną odmianę omawianej tu kategorii warunków brzegowych otrzymamy wtedy, gdy układ jest połączony (przez część lub całość powierzchni granicznej S_g) ze zbiornikiem, *zapewniającym idealne mieszanie* jego zawartości. W takich przypadkach dopływający do zbiornika całkowity strumień masy (adwekcyjny m_a i dyfuzyjny m_d) powoduje zmianę jej stężenia w tym zbiorniku (o kubaturze V). Ze względu na dużą intensywność idealnego mieszania (o ile możemy założyć jego występowanie) stężenie to jest w każdej chwili czasu stałe w całym zbiorniku, a tym samym równe stężeniu brzegowemu c_b dla końcowego przekroju kanału dopływowego oraz dla początkowego przekroju kanału odpływowego – AB oraz CD na rys. 4.30a). Bilans masy tej substancji ma postać następującą:

$$V \frac{\partial c_b}{\partial t} = \int_{S_g} (m_a + m_d) dS_g. \quad (4.271)$$

Korzystając z (4.12) i (4.84), możemy następująco przepisać ostatnią relację:

$$V \frac{\partial c_b}{\partial t} = \int_{S_g} \left(c_c u_x - D_M \frac{\partial c_b}{\partial x} \right) dS_g. \quad (4.272)$$

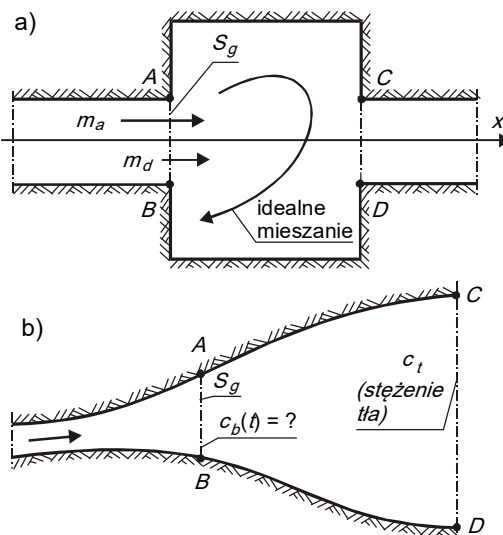
Dla energii cieplnej możemy natomiast napisać, że

$$V \frac{\partial T_b}{\partial t} = \int_{S_g} \left(T_b u_x - D_W \frac{\partial T_b}{\partial x} \right) dS_g. \quad (4.273)$$

W szczególnym przypadku, interesującym praktycznie, gdy kubatura zbiornika jest bardzo duża (ocean, morze), mamy

$$V \rightarrow \infty, \text{ skąd } \frac{\partial c_b}{\partial t} \rightarrow 0. \quad (4.274)$$

Oznacza to, że dla strumieni wpadających do dużych zbiorników o idealnym mieszanym jako warunek Dirichleta możemy przyjmować stałe stężenie oraz/lub temperaturę, równe stężeniu oraz/lub temperaturze „tła” w zbiorniku.



Rys. 4.30. Warunek Dirichleta: a) zbiornik o idealnym mieszanii, b) zbiornik bez mieszania

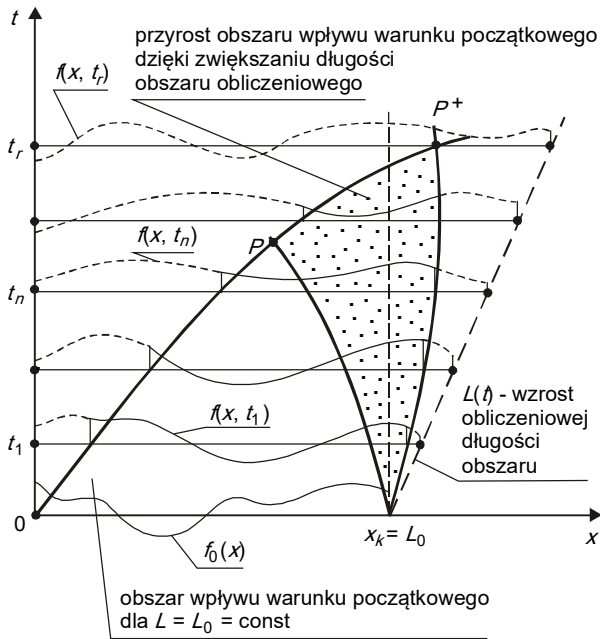
Podkreślmy, że stosowanie ostatnich trzech relacji uwarunkowane jest występowaniem bardzo energicznego mieszania zawartości zbiornika. Gdy wymóg ten nie jest spełniony, stężenie brzegowe nie jest z góry znane, nawet w przybliżeniu. Gdy jednak (pomimo braku mieszania) zbiornik ma bardzo dużą pojemność, wtedy w znacznej odległości od przekrojów dopływowych i odpływowych stężenie oraz/lub temperatura płynu mogą praktycznie nie ulegać zmianom i być równe odpowiednim wartościom tła (np. stężenie c_t wzdłuż linii CD – rys. 4.30b). W takich przypadkach można rozszerzyć badany obszar (przesuwając brzeg z położenia AB do położenia CD na rys. 4.30b). Komplikując co prawda proces rozwiązywania równań (gdyż zwiększamy rozmiary obszaru), uzyskujemy dzięki temu możliwość postawienia warunku Dirichleta.

Aby jednak zastosować tę metodę, musimy mieć racjonalny stopień pewności, że oddalamy brzeg obszaru poza zasięg zmian stężenia oraz/lub temperatury. Można tę pewność uzyskać albo wykorzystując wyniki pomiarów (także archiwalnych) wskaźników jakości płynu (wody lub powietrza), albo metodą prób i błędów (wykonując obliczenia dla różnych przemieszczeń brzegu).

Wykorzystany powyżej fakt słabnięcia wpływu wartości brzegowych stężenia oraz/lub temperatury ze wzrostem oddalenia od tego brzegu wykazuje podobieństwo do „zasady zanikającej pamięci” (par. 4.11.3), z tym zastrzeżeniem, że ta ostatnia odnosi się do „oddalenia” brzegu w czasie, zaś obecnie mówimy o oddaleniu w przestrzeni. Nasuwa się więc wniosek, że przy braku dokładnego warunku Dirichleta na interesującym nas brzegu obszaru można zastosować uproszczone podejście, polegające na rozszerzeniu rozważanego obszaru i zadaniu na nowym brzegu warunków oszacowanych z pewnym przybliżeniem (o ile potrafimy to zrobić). Hipotetycznie jest to możliwe dla całego brzegu, co ilustruje rys. 4.28. Jeżeli do naszych celów musimy znać stężenie na odcinku (x_{WL} , x_{WP}), a nie mamy pewności co do warunków brzegowych, to dokładne rozwiązanie możemy wyznaczyć tylko w obszarze wpływu warunku początkowego (trójkąt o wierzchołku P' – uwaga: warunek początkowy musi być w takim przypadku określony dokładnie; nie jest możliwe stosowanie oddalenia brzegu względem obu zmiennych, czasowej i

przestrzennej jednocześnie). Jest to obszar z reguły dużo mniejszy niż nas interesujący. Jeżeli w takiej sytuacji jako obszar obliczeniowy przyjmijemy odcinek $(0, L)$, zaznaczony na rys. 4.28, to zakres wiarygodności rozwiązania znacznie wzrośnie.

Istotnym problemem jest tu sam wzrost wielkości obszaru, gdyż przedmiotowe obliczenia najczęściej wykonujemy numerycznie. Jest to kwestia niezbędnej pamięci komputera oraz czasu trwania obliczeń. Kompromisowym rozwiązaniem (między dokładnością obliczeń a kosztem ich wykonania) jest tzw. *metoda uciekającego brzegu*. Jej zasadę pokazano na rys. 4.31, który odnosi się do typowej dla nas sytuacji, gdy znamy warunek Dirichleta na brzegu dopływowym (o czym już była mowa), zaś nie znamy go na brzegu odpływowym (gdź często tam właśnie zlokalizowany jest obiekt, dla ochrony którego przeprowadzamy matematyczną symulację procesu migracji zanieczyszczeń). Obliczenia rozpoczynamy wtedy dla rzeczywiście interesującego nas odcinka, a z upływem czasu wydłużamy go sukcesywnie. Na „oddalającym się brzegu” możemy zadawać możliwy do sformułowania warunek brzegowy, przy czym możemy mniejszą wagę przywiązać do jego dokładności.



Rys. 4.31. Ilustracja „metody uciekającego brzegu” (por. rys. 4.28)

Metodę tę można jednakże stosować tylko wtedy, gdy sztuczne oddalanie brzegu (lub jego części) nie koliduje z rzeczywistym charakterem układu. Przykładowo, jeżeli brzeg $x_K = L$ jest wyznaczony przez ujście rzeki do morza, to radykalna zmiana charakteru przepływu w tym miejscu nie pozwala na zastosowanie „metody uciekającego brzegu”.

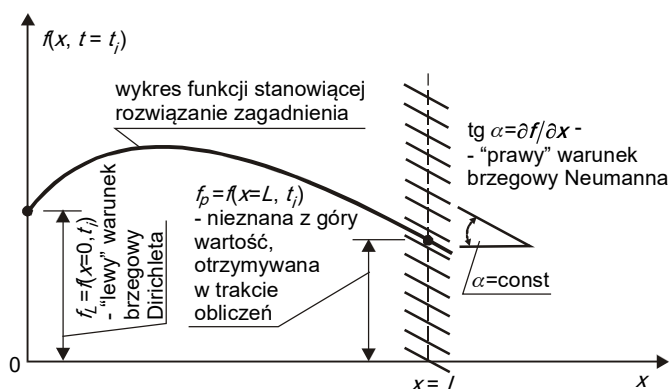
Typowym natomiast przypadkiem jej przydatności jest opis awaryjnego zrzutu zanieczyszczeń do długiej rzeki. Tak długo, jak przed frontem obszaru zanieczyszczonego znajduje się względnie czysta woda rzeczna, możemy prowadzić obliczenia, sukcesywnie oddalając brzeg odpływowy.

4.11.4.3. Praktyczne określanie warunku Neumanna. Posługiwanie się warunkiem Neumanna znakomicie ułatwiają jego dwie interpretacje – fizyczna i geometryczna. Pierwsza z nich wynika bezpośrednio z prawa Ficka (gdy rozważamy stężenie substancji rozpuszczonej) oraz z prawa Fouriera (dla rozkładu temperatury). Oznaczając przez n kierunek prostopadły do brzegu (dodatni wtedy, gdy jest zorientowany na zewnątrz obszaru), możemy wobec (4.84) i (4.99) napisać, że:

$$m_{dn} = -D_M \frac{\partial c}{\partial n}, \quad q_{dn} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \quad (4.275)$$

Widzimy teraz, że warunek brzegowy Neumanna określa normalną do brzegu składową strumienia dyfuzyjnego (odpowiednio masy oraz energii cieplnej), ze znakiem minus, dzieloną odpowiednio przez współczynnik dyfuzji molekularnej lub współczynnik przewodzenia ciepła.

Druga interpretacja, geometryczna, znana jest z podstawowej teorii rachunku różniczkowego, w ramach której [67, 147] pokazuje się, że wartość pochodnej funkcji określa w każdym punkcie nachylenie stycznej do wykresu tej funkcji. Obrazuje to rys. 4.32 (dla czytelności pokazano tam wykres funkcji jednej zmiennej, gdy $n = x$). Można powiedzieć, że warunek Neumanna określa orientację zespołu równoległych „elementów kierunkowych”, wyznaczających orientację wykresu szukanej funkcji na brzegu. W trakcie rozwiązywania rozpatrywanego równania różniczkowego otrzymujemy rzędną konkretnej „przewodnicy”, dla której na początku znamy tylko nachylenie.



Rys. 4.32. Interpretacja warunku brzegowego Neumanna

Sformułowanie warunku Neumanna (4.266) dla zagadnień migracji zanieczyszczeń wymaga więc uprzedniego określenia dyfuzyjnego strumienia masy oraz/lub energii cieplnej. W ujęciu ścisłym jest to w zasadzie możliwe tylko dla brzegu nieprzepuszczalnego, zapewniającego izolację układu ze względu na ruch masy oraz/lub ciepła. W takich przypadkach z definicji mamy:

$$\frac{\partial c}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial n} = 0. \quad (4.276)$$

Ten typ warunku możemy więc zadać na odcinkach BC, DE, AH oraz GF brzegu obszaru (rys. 4.29).

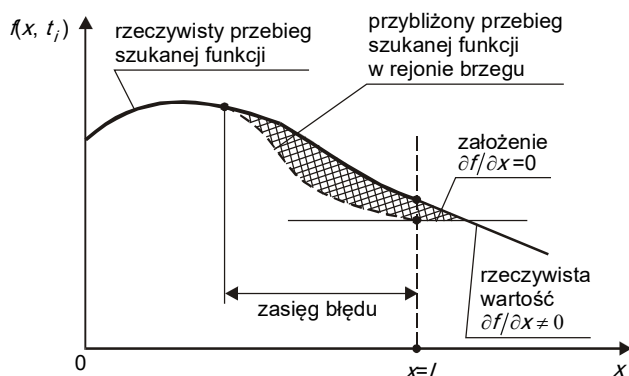
W praktyce inżynierskiej warunek Neumanna bywa bardzo często stawiany na brzegach odpływowych, ale w wersji uproszczonej. Uproszczenie to polega na *pominięciu strumienia dyfuzyjnego* (masy oraz/lub energii cieplnej), mimo że w rzeczywistości jest on

różny od zera. Potocznie mówi się wtedy, że na brzegu odpływowym zakłada się „zerowy strumień dyfuzyjny”. Interpretacja tego założenia pokazana jest na rys. 4.33. Jak widać tam, pominięcie rzeczywistego strumienia dyfuzyjnego wprowadza do obliczeń pewien błąd. Wyznaczone rozwiązanie różni się na pewnym odcinku od rozwiązania dokładnego [116]. Wielkość tego błędu uzależniona jest od proporcji między intensywnością adwekcji oraz intensywnością dyfuzji, którą określa *liczba Pecleta* (D_s – patrz równ. (4.195))

$$Pe = \frac{vL}{D_s}, \quad (4.277)$$

oraz od stopnia niestacjonarności zjawiska, wyrażonego *liczbą Strouhala* Sh (patrz także (5.10) [101]. Jeżeli jako ten ostatni parametr przyjąć stosunek długości obszaru skażonego L_{os} do długości całego rozważanego odcinka, to

$$Sh = L_{os}/L. \quad (4.278)$$



Rys. 4.33. Konsekwencja pominięcia strumienia dyfuzyjnego na brzegu odpływowym

Ujęcie takie odnosi się do bardzo częstego w praktyce awaryjnego zrzutu zanieczyszczeń do względnie czystego odbiornika. Jeżeli czas trwania tego zrzutu oznaczymy przez t_{os} , to

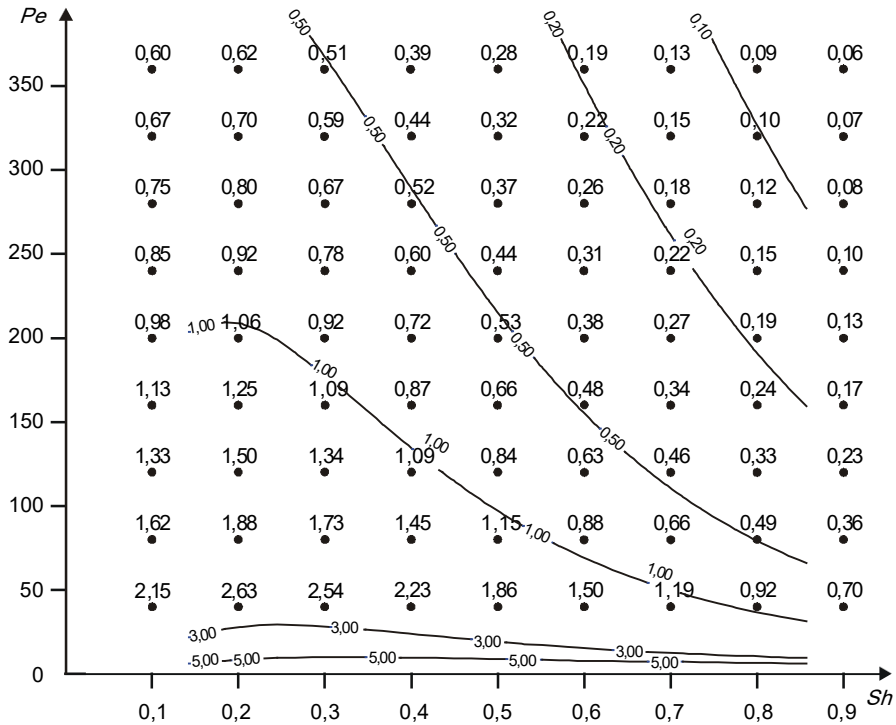
$$L_{os} \approx v t_{os}. \quad (4.279)$$

Relacja powyższa ułatwia oszacowanie liczby Strouhala (4.278). Błąd BS, powodowany przez pominięcie strumienia dyfuzyjnego na brzegu (czyli przez przyjęcie relacji (4.276)) można wtedy obliczyć ze wzoru [179]

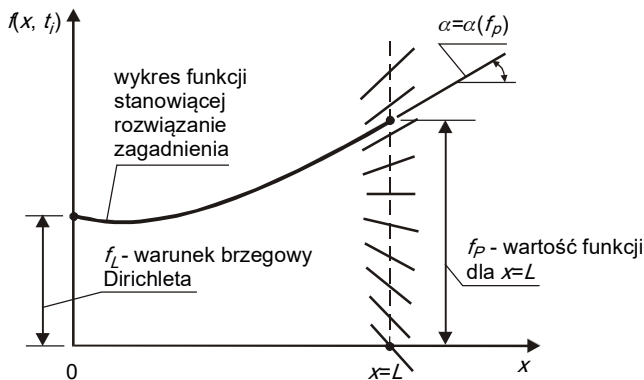
$$BS = 117,6 Sh^{0,76} \exp(-1,28 Sh) Pe^{-0,22-0,71Sh}, \quad (4.280)$$

lub odczytać z nomogramu na rys. 4.34. Jak widać tam, błąd ten jest niewielki, gdyż nie przekracza paru procent.

4.11.4.4. Praktyczne określanie warunku Hankela. Sens tej relacji określony jest przez kombinację warunków Dirichleta i Neumanna – na pewnym odcinku brzegu zadajemy związek między wartością funkcji a nachyleniem stycznej do jej wykresu (rys. 4.35). W tym przypadku kierunek „prowadniczy”, wykorzystanej do interpretacji warunku Neumanna na rys. 4.32, jest inny dla każdej wartości funkcji, przy czym ani ta wartość, ani ten kierunek nie są znane z góry, lecz wyznaczane w trakcie rozwiązywania równania.



Rys. 4.34. Nomogram do wzoru (4.280)



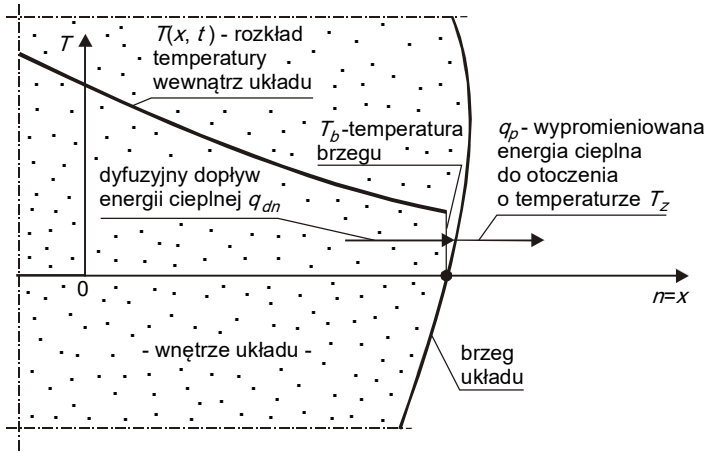
Rys. 4.35. Interpretacja warunku brzegowego Hankela

Warunek Hankela jest formalnie najbardziej złożoną postacią warunku brzegowego. Można go postawić wszędzie tam, gdzie masa oraz/lub energia są do powierzchni brzegowej „doprowadzane” z głębi obszaru wskutek transportu molekularnego (i wyrażone jako odpowiedni jednostkowy strumień masy m_{dn} oraz/lub energii q_{dn} – patrz (4.275)), zaś na zewnątrz obszaru „odprowadzane” są przez inny mechanizm transportu. Klasycznym przy-

kładem jest tu *wypromieniowywanie energii cieplnej* z powierzchni ogrzanego ciała. Sytuację obrazuje rys. 4.36. Zgodnie z prawem Stefana-Boltzmann'a, jednostkowy strumień energii wypromieniowanej przez powierzchnię jest proporcjonalny do różnicy czwartych potęg temperatur bezwzględnych powierzchni (T_b) i otoczenia (T_z), wobec czego można napisać, że

$$-\lambda \frac{\partial T_b}{\partial n} = \varepsilon C(T_b^4 - T_z^4), \quad (4.281)$$

gdzie: ε – emisyjność powierzchni (dla wody wartość ta leży w granicach 0,90 – 0,96), $C = 5,67 \cdot 10^{-8}$ (W/m²K⁴) – stała Stefana-Boltzmann'a.



Rys. 4.36. Warunek Hankela wynikający z prawa Stefana-Boltzmann'a

Drugim procesem fizycznym, prowadzącym do warunku Hankela, jest *przejmowanie ciepła*. Jego zasadniczym elementem jest *konwekcyjny* odbiór ciepła przez otoczenie (o temperaturze T_z) układu (którego brzeg znajduje się w temperaturze T_b). Ilościowo przejmowanie ciepła opisane jest przez tzw. „prawo Newtona” (użyty tu cudzośłów ma na celu podkreślenie, że nie jest to prawo ani postulat fizyczny, lecz relacja empiryczna o walorach technicznych). Mówi ono, że jednostkowy strumień przejmowanej energii cieplnej jest proporcjonalny do różnicy temperatur ($T_b - T_z$) [146]. *Współczynnik przejmowania ciepła* α_T wyznaczany jest doświadczalnie (patrz też podrozdz. 8.5). Szczególnie wygodna dla nas jest relacja, uzależniająca go od prędkości wiatru w [48]. Pozwala ona następująco wyrazić warunek Hankela (wartość w należy podać w m/s):

$$-\lambda \frac{\partial T_b}{\partial n} = \alpha_T(T_b - T_z) = (5,02 + 1,224 w)(T_b - T_z) \text{ [W/m}^2\text{]}. \quad (4.282)$$

Mówiąc o procesach wymiany ciepła należy jeszcze wspomnieć o stracie ciepła wywołanej powierzchniowym parowaniem wody. Przyjmując, że energia ta od strony wody doprowadzana jest dyfuzyjnie (równ. (4.275)), mamy tu następujący warunek Hankela [15]:

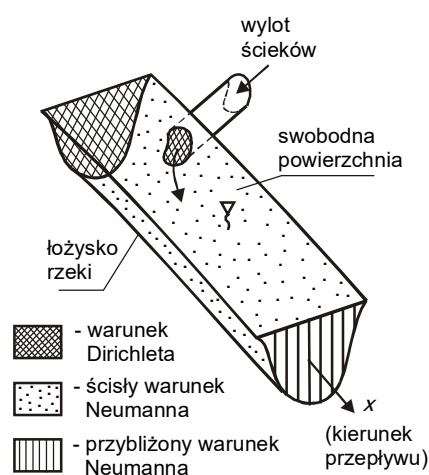
$$-\lambda \frac{\partial T_b}{\partial n} = (12,3 + 3,1 w)(T_b - T_z) \text{ [W/m}^2\text{]}. \quad (4.283)$$

Omówione powyżej trzy procesy, opisujące odpływ energii cieplnej z powierzchni granicznej układu do otoczenia (lub odwrotnie, jeśli temperatura otoczenia jest wyższa od temperatury powierzchni), mogą występować równocześnie. W takim przypadku po prawej stronie relacji, wyrażającej omawiany tu rodzaj warunku brzegowego, występuje suma odpowiednich wyrażeń. Zauważmy przy okazji, że w dokładniejszym ujęciu bilans energii cieplnej można wyrazić bardziej szczegółowo, osobno uwzględniając na przykład promieniowanie powietrza, wody, łożyska rzeki i roślinności, dodając wpływ ewentualnych zjawisk lodowych itd. [9, 37]. W niektórych przypadkach duże znaczenie może mieć wymiana ciepła między płynem (wodą lub powietrzem atmosferycznym) a materiałem podłoża (łożyskiem rzeki, powierzchnią terenu itp.). Wymianę ciepła opisuje się wtedy najczęściej równaniem analogicznym do wyżej omówionego „prawa przejmowania ciepła” Newtona, typu relacji (4.282), przy czym współczynniki proporcjonalności należy wyznaczyć indywidualnie dla rozważanego zagadnienia. Jest to istotna przeszkoda w stosowaniu bardzo drobiazgowych modeli, gdyż bardzo często niska dokładność określenia dużej liczby współczynników niweczy formalny wzrost dokładności, związany z uwzględnieniem dużej liczby procesów jednostkowych.

Warunek Hankela w niektórych sytuacjach można także formułować dla procesów wymiany masy. Nie ma tu co prawda uniwersalnych zależności, obejmujących szerokie klasy zagadnień, lecz często przydatne jest (analogiczne do omówionej już relacji dla strumienia ciepła) *prawo przejmowania masy Newtona* [146], zgodnie z którym jednostkowy strumień przejmowanej masy jest proporcjonalny do różnicy między stężeniem danej substancji na brzegu c_b , a jej stężeniem c_z w otoczeniu układu. Jeżeli dopływ masy do brzegu w dalszym ciągu możemy opisać relacją typu dyfuzyjnego (prawem Ficka), to mamy wtedy warunek Hankela

$$-D_M \frac{\partial c_b}{\partial n} = \alpha_M (c_b - c_z). \quad (4.284)$$

Współczynnik przejmowania masy α_M należy wyznaczyć indywidualnie. Przykładem takiego procesu może być parowanie powierzchniowe substancji dyfundującej w układzie.



Rys. 4.37. Przykład mieszane warunku brzegowego dla zagadnienia 3D

4.11.4.5. Warunki mieszane. Teoria równań różniczkowych dopuszcza formułowanie różnych typów warunków brzegowych na różnych częściach brzegu układu. Mówimy wtedy o *mieszanych warunkach brzegowych*. W problemach technicznych taki sposób stawiania zagadnienia jest zresztą typowy. Charakterystyczny dla problemu migracji zanieczyszczeń przykład mieszane zagadnienia brzegowego pokazano na rys. 4.37.

Podkreślmy tu raz jeszcze, że formułowanie warunków granicznych jest złożonym i zróżnicowanym etapem stawiania problemu. Podane w niniejszym paragrafie zależności, opisujące te warunki, należy traktować raczej jako przykłady, gdyż w konkretnych przypadkach zawsze możemy stanąć wobec nieznanymi dotychczas potrzeb, ale też i nieznanymi jeszcze możliwościami.

4.11.4.6. Warunki zgodności. Dotychczasowe rozważania nad warunkami brzegowymi dotyczyły układu, o wewnętrznej strukturze opisanej równaniami różniczkowymi, kontaktującego się ze swym otoczeniem, które z kolei było traktowane jako pojęcie jednorodne (o jednej temperaturze oraz/lub stężeniu substancji rozproszonej).

Jednak w niektórych sytuacjach możemy opisywać zachowanie się dwóch odrębnych układów, kontaktujących się poprzez *powierzchnię rozdziału* (często będzie to *powierzchnia międzyfazowa*), a wykazujących wzajemne oddziaływania (wymianę masy oraz/lub ciepła). W takich przypadkach jako warunki brzegowe służyć mogą *warunki zgodności*, wyrażające równowagę tych oddziaływań po obu stronach powierzchni rozdziału.

Nie da się wyczerpująco przedstawić tego zagadnienia, gdyż praktyka zawsze może przynieść jeszcze nie rozwiązane problemy. Ograniczmy się wobec tego tylko do przedstawienia przykładowej sytuacji, dość typowej dla rozważanych tu kwestii. Wyobraźmy sobie płaską i poziomą powierzchnię rozdziału między dwoma niemieszającymi się płynami A i B, w których rozważamy dyfuzję pewnej substancji (rys. 4.38). Przyjmijmy, że prędkość odnowy powierzchni rozdziału (pkt 4.11.4.2) jest na tyle umiarkowana, iż na powierzchni tej mamy równowagę wymiany masy, czyli

$$c_{Ab} = c_{Bb}. \quad (4.285)$$

Drugi warunek zgodności dotyczy strumieni dyfuzyjnych – „dochodzącego” ze strony jednego płynu i „odchodzącego” w głąb drugiego. Mówi ten warunek, że

$$D_{MA} \frac{\partial c_{Ab}}{\partial z} = D_{MB} \frac{\partial c_{Bb}}{\partial z}. \quad (4.286)$$

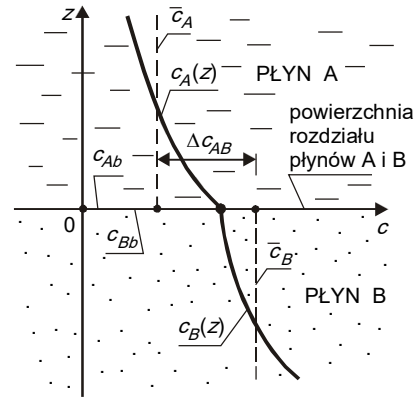
W przypadku wymiany ciepła mamy oczywiście

$$\lambda_A \frac{\partial T_{Ab}}{\partial z} = \lambda_B \frac{\partial T_{Bb}}{\partial z}. \quad (4.287)$$

Takie podejście, w którym opisujemy pole stężeń oraz/lub temperatury dla dwóch (lub dla większej liczby) sąsiadujących ze sobą układów jest czasochłonne i trudne. Stąd w technice stosuje się niekiedy uproszczone *modele stratyfikowane*. Istotą takiego modelu jest wprowadzenie dla każdej z warstw średnich wartości każdej ze zmiennych (np. \bar{c}_A i \bar{c}_B na rys. 4.38). Wymiana masy jest wtedy opisywana omówionym powyżej „prawem przejścia masy” Newtona, zgodnie z którym

$$q_{MAB} = \alpha_M (\bar{c}_B - \bar{c}_A). \quad (4.288)$$

Modelom stratyfikowanym nieco więcej uwagi poświęcimy w podrozdz. 10.4.



Rys. 4.38. Przykładowy warunek zgodności na powierzchni rozdziału dwóch płynów

4.12. Rozwiązywanie zagadnień

4.12.1. Klasyfikacja metod

Rozważane tu zagadnienia fizyki matematycznej opisywane są równaniami różniczkowymi cząstkowymi, którym niekiedy towarzyszą równania algebraiczne. Klasyczne rozwiązania takich równań (lub ich układów) mogą być analizowane ze względu na swą formę (*wyrażenia matematyczne, ciągi liczb* lub *wykresy*) oraz ze względu na stopień, w jakim spełniają równanie (lub równania) wyjściowe (mamy tu rozwiązania *dokładne* oraz *przybliżone*). Łącząc obie powyższe kategorie, otrzymamy następującą klasyfikację metod rozwiązywania interesujących nas zagadnień:

- metody analityczne, dokładne,
- metody analityczne, przybliżone,
- metody numeryczne (z natury rzeczy przybliżone),
- metody graficzne (także przybliżone).

4.12.2. Dokładne rozwiązania analityczne

4.12.2.1. Uwagi ogólne. Tytułowa kategoria rozwiązań jest najkorzystniejsza pod każdym względem. Mają one postacie zamkniętych wyrażeń matematycznych, które ściśle spełniają rozważane równania wraz z warunkami granicznymi. Umożliwiają one szeroką analizę badanych zagadnień, dyskusję różnych wariantów, proste szacowanie wpływu występujących w nich czynników i parametrów.

Teoria wyznaczania dokładnych rozwiązań analitycznych prezentowana jest w podręcznikach matematyki. Niestety, stopień jej rozwoju pozwala na uzyskiwanie wyników tylko dla stosunkowo prostych postaci równań (prostych w porównaniu z ich postaciami wyjściowymi), regularnych kształtów obszarów określoności rozwiązania oraz mało skomplikowanych warunków granicznych.

W dalszym ciągu tego podrozdziału dokonamy systematycznego przeglądu kolejnych wersji równania transportu wielkości skalarnej (4.195), przy czym dla czytelności rozważań ograniczymy się do zjawisk *jednowymiarowych* (gdy zjawisko przebiega tylko wzdłuż jednego kierunku przestrzeni, który reprezentowany jest przez oś $0x$) oraz *jednokierunkowych* (gdy wektor prędkości adwekcji ma tylko jedną niezerową składową $u_x = v$), gdy równanie transportu przyjmuje następującą postać:

$$\frac{\partial s_p}{\partial t} + v \frac{\partial s_p}{\partial x} = D_s \frac{\partial^2 s_p}{\partial x^2} + Z_s. \quad (4.289)$$

Przegląd taki pozwoli na uwidocznienie wpływu poszczególnych członów równania ogólnego oraz wzajemnych relacji między tymi członami. Podkreślimy jednak, że uproszczenie to ma chwilowo charakter czysto formalny. Fizyczne uzasadnienie różnych typów uproszczeń, metodyka ich wprowadzania oraz praktyczne konsekwencje omówione będą w rozdz. 5.

4.12.2.2. Jednoczłonowe wersje równania ogólnego. Zakładając, że rozważane jednowymiarowe i jednokierunkowe równanie transportu wielkości skalarnej s_p ma zawierać tylko jeden człon, możemy sformułować cztery jego następujące wersje:

$$\frac{\partial s_p}{\partial t} = 0, \quad (4.290)$$

$$v \frac{\partial s_p}{\partial x} = 0, \quad (4.291)$$

$$D_s \frac{\partial^2 s_p}{\partial x^2} = 0, \quad (4.292)$$

$$Z_s = 0. \quad (4.293)$$

Trzy z nich (dwie pierwsze i ostatnia) tylko wyjątkowo mogą być interpretowane jako końcowe postacie równania ogólnego, czyli jako samodzielne równania. Mają one bowiem charakter znanych *a priori* informacji, pozwalających na uproszczenie równania ogólnego (4.289).

Odmienny sens ma natomiast relacja (4.292). Opisuje ona proste, ale realne zadanie praktyczne: ustalony transport nierozkładalnej wielkości skalarnej s_p , przebiegający w ośrodku nieruchomym, gdy $v = 0$. Innymi słowy, jest to szczególna postać równania transportu, odpowiadająca warunkom ((4.290), (4.291), (4.293)). Jej zastosowanie obrazują dwa poniższe przykłady.

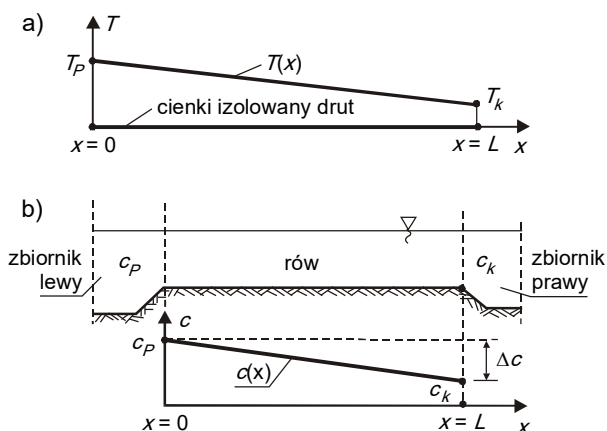
Przykład 4.4

Dwa końce prostego, cienkiego drutu miedzianego o długości L utrzymywane są w temperaturach odpowiednio T_0 i T_k . Pobocznicza drutu pokryta jest izolacją termiczną. Wyznaczyć rozkład temperatury wzdłuż drutu.

Rozwiązanie

Warunki zadania pozwalają przyjąć, że rozkład temperatury jest funkcją tylko jednej zmiennej przestrzennej $s_p = T(x)$. Równanie (4.292) ma więc następującą postać (ze względu na występowanie tylko jednej zmiennej niezależnej, możemy pochodną cząstkową zastąpić pochodną zwyczajną):

$$D_w \frac{d^2 T}{dx^2} = 0.$$



Rys. 4.39. Rozkład temperatury (przykład 4.4) oraz stężenia (przykład 4.5)

Dzieląc powyższą relację obustronnie przez $D_w = 0$, otrzymujemy prostą zależność, która po dwukrotnym scałkowaniu daje

$$T(x) = C_1 x + C_2 .$$

Korzystając z warunków brzegowych ($T = T_0$ dla $x = 0$ oraz $T = T_k$ dla $x = L$) wyznaczmy stałe całkowania C_1 oraz C_2 , otrzymując rozwiązanie zadania w postaci funkcji (rys. 4.39a)

$$T(x) = \frac{T_k - T_0}{L} x + T_0 . \quad \blacksquare$$

Przykład 4.5

Dwa zbiorniki otwarte połączone są rowem o długości L . Poziom wody w całym układzie jest stały, a prędkość wody w rowie jest równa zero. Stężenie chlorków w obu zbiornikach różni się o Δc . Wyznaczyc rozkład stężenia chlorków wzdłuż rowu.

Rozwiązanie

Również tutaj warunki zadania pozwalają na przyjęcie modelu jednowymiarowego, gdy

$$D_M \frac{d^2 c}{dx^2} = 0 .$$

Postępując jak w poprzednim przykładzie (warunki brzegowe: $c = c_0$ dla $x = 0$ oraz $c = c_0 + \Delta c$ dla $x = L$), otrzymujemy następujące rozwiązanie (rys. 4.39b):

$$c(x) = c_0 - \frac{\Delta c \cdot x}{L} . \quad \square$$

Jak widać z powyższych przykładów, ustalony dyfuzyjny transport nierozkładalnej wielkości skalarniej w ośrodku jednorodnym opisany jest funkcją liniową

$$s_p(x) = s_{p0} + \frac{s_{pk} - s_{p0}}{L} x . \quad (4.294)$$

Nasuwa się pytanie, jak długo trwa ustalanie się stanu, opisanego funkcją (4.294). Odpowiedź na nie uzyskamy po rozwiązaniu odpowiedniego równania dla procesu nieustalonego (pkt 4.12.2.3).

W tym miejscu zauważmy jeszcze, że gdy ośrodek ma charakter niejednorodny (współczynnik transportu D_s jest zmienny w przestrzeni), wtedy równanie (4.292) przyjmuje postać (patrz (4.174))

$$\frac{d}{dx} \left(D_s \frac{ds_p}{dx} \right) = 0 . \quad (4.295)$$

Dwukrotne całkowanie pozwala napisać, że

$$s_p(x) = C_1 \int \frac{dx}{D_s(x)} + C_2 . \quad (4.296)$$

Konkretne rozwiązanie otrzymamy tu, znając funkcję $D_s(x)$. Odpowiedni wykres $s_p(x)$ nie będzie już linią prostą.

4.12.2.3. Dwuczłonowe wersje równania ogólnego – stany nieustalone. Dla zależności (4.289) możemy napisać sześć dwuczłonowych równań szczególnych, z czego trzy dla przypadków nieustalonych. Każde z nich ma już pewne znaczenie praktyczne, toteż rozważmy je po kolei.

Jako przypadek pierwszy rozważmy *równanie nieustalonej adwekcji* (bez dyfuzji i czynników źródłowych)

$$\frac{\partial s_p}{\partial t} + v \frac{\partial s_p}{\partial x} = 0, \quad (4.297)$$

które oznacza zerowanie się *pochoďnej substancjalnej*

$$\frac{Ds_p}{Dt} = 0. \quad (4.298)$$

Jak wynika z fizycznej interpretacji tej pochoďnej (np. [134]), w przypadku takim funkcja $s_p(x, t)$ zachowuje stałą wartość wzdłuż *charakterystyk*, czyli linii opisanych relacją [134, 157]

$$dx/dt = v. \quad (4.299)$$

Zauważmy, że zależność (4.297) jest równaniem różniczkowym cząstkowym *pierwszego rzędu*. Oznacza to, że obok warunku początkowego (4.261) lub odpowiednio (4.262) musimy w tym przypadku zadać *tylko jeden warunek brzegowy* dla wartości $x = x_L$

$$s_{pL} = s_p(x = x_L, t). \quad (4.300)$$

Relacja (4.299) mówi, iż dany warunkami granicznymi (początkowymi i brzegowymi) znany rozkład szukanej funkcji przenoszony jest *bez zmiany wartości wzdłuż charakterystyk*. Gdy prędkość adwekcji jest stała, wtedy charakterystyki są rodziną *linii prostych równoległych*, toteż początkowy kształt wykresu nie ulega zmianie, a jedynie zostaje poddany translacji (rys. 4.40a). W przeciwnym razie, przy zmiennej prędkości adwekcji, gdy charakterystyki nie są do siebie równoległe, rozkład ten ulega głębszym zmianom (rys. 4.40b) – poszczególne rzędne zachowują co prawda stałą wartość, lecz oddalają się od siebie lub zbliżają do siebie.

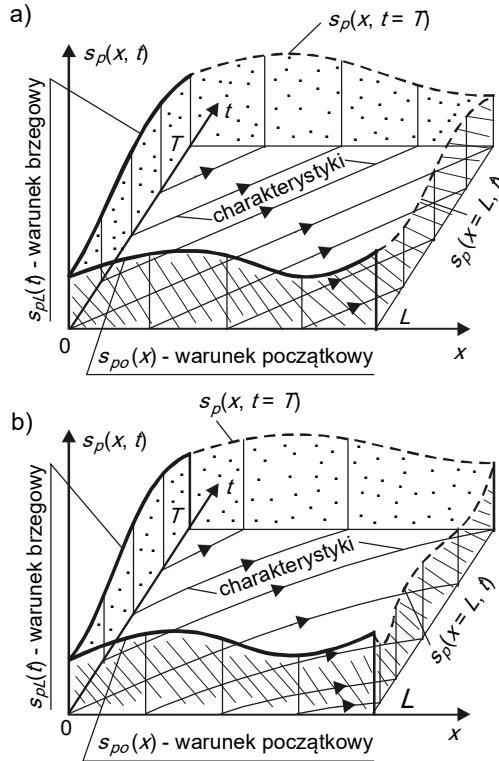
Drugi z rozważanych wariantów równania ogólnego, mający postać

$$\frac{\partial s_p}{\partial t} = D_s \frac{\partial^2 s_p}{\partial x^2}, \quad (4.301)$$

opisuje *nieustaloną dyfuzję* (bez adwekcji i bez procesów źródłowych). Gdy rozważamy proces w obszarze ograniczonym, rozwiązanie tego równania (spełniające warunki początkowe i brzegowe) należy poszukiwać prawie zawsze w postaci przybliżonej (analitycznej lub numerycznej). Jednakże dla obszaru nieograniczonego (gdy $-\infty < x < +\infty$), będącego dogodnym modelem takich układów rzeczywistych, których granice są oddalone od rejonu zmienności funkcji s_p , możemy uzyskać dokładne rozwiązanie równania (4.301) w postaci analitycznej. Co więcej, dla pewnych prostych warunków początkowych wyraża się ono wygodną w stosowaniu i niezwykle pożyteczną relacją (patrz (4.317)).

Ten klasyczny wynik otrzymuje się *metodą rozdzielenia zmiennych* (zwaną też *metodą Fouriera*) [57]. Polega ona na poszukiwaniu rozwiązania w postaci iloczynu (lub sumy iloczynów) funkcji, z których każda zależy tylko od jednej zmiennej niezależnej. W rozważanym przypadku mamy więc [53]

$$s_p(x, t) = X_p(x) T_p(t) . \quad (4.302)$$



Rys. 4.40. Przebieg niustalanej adwekcji wielkości skalarnej
(a – przy stałej prędkości v , b – przy zmiennej prędkości v)

Podstawiając powyższe do (4.301), po wykonaniu prostych przekształceń, otrzymujemy następującą relację:

$$\frac{1}{D_s T_p} \frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{X_p} \frac{d^2 X_p}{dx^2} . \quad (4.303)$$

Zauważmy, że po jej lewej stronie występuje kombinacja funkcji czasu t i jej pochodnej, zaś po prawej – kombinacja funkcji zmiennej przestrzennej x i jej drugiej pochodnej, a obie te kombinacje są sobie równe. Jest to możliwe tylko wtedy, gdy *oba te wyrażenia są stałe*. Ze względu na wymóg ograniczoności rozwiązania rozważanego zagadnienia (gdyby dążyło ono do nieskończoności, byłoby to sprzeczne z wynikami obserwacji przebiegu procesów transportu), ta stała wartość musi być ujemna. Wobec powyższego możemy – zamiast (4.303) – napisać dwa równania różniczkowe zwyczajne:

$$\frac{1}{D_s T_p} \frac{dT_p}{dt} = -\lambda^2 , \quad (4.304)$$

$$\frac{1}{X_p} \frac{d^2 X_p}{dx^2} = -\lambda^2. \quad (4.305)$$

Całkując powyższe, otrzymujemy dwie funkcje:

$$T_p(t) = C_T \exp(-\lambda^2 D_s t), \quad (4.306)$$

$$X_p(x) = C_X \cos[\lambda(x - \alpha)]. \quad (4.307)$$

Wielkości λ oraz α są tu dowolnymi liczbami rzeczywistymi. Wobec (4.302) iloczyn

$$s_p^s(x, t, \lambda, \alpha) = C \exp(-\lambda^2 D_s t) \cos[\lambda(x - \alpha)], \quad (4.308)$$

gdzie dla uproszczenia podstawiono

$$C = C_T C_X, \quad (4.309)$$

określa szczególne rozwiązanie równania (4.301). Jest ono funkcją parametrów λ i α . Aby otrzymać rozwiązanie ogólne, musimy scałkować (4.308) względem całego zakresu zmienności obu tych parametrów, czyli napisać, że

$$s_p(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} C \exp(-\lambda^2 D_s t) \cos[\lambda(x - \alpha)] d\lambda d\alpha. \quad (4.310)$$

Można pokazać (na przykład [53]), że jeśli szukane rozwiązanie ma spełniać warunek początkowy ($-\infty < x < +\infty$)

$$s_p(x, t = 0) = \varphi_s(x), \quad (4.311)$$

to relacja (4.310) przyjmuje postać

$$s_p(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{D_s \pi t}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_s(\alpha) \exp\left[-\frac{(x - \alpha)^2}{4D_s t}\right] d\alpha. \quad (4.312)$$

Jest to właśnie poszukiwane przez nas ogólne rozwiązanie równania (4.301).

Bardzo ważną w teorii dyfuzji relację otrzymujemy wtedy, gdy funkcja, opisująca warunek początkowy $\varphi_s(x)$, ma charakter *impulsu*, usytuowanego w punkcie $x = x_0$, który można wyrazić *funkcją delta* δ (*funkcją Diraca*), czyli gdy mamy

$$\varphi_s(x) = M \delta(x - x_0). \quad (4.313)$$

Mnożnik M nazywamy *intensywnością impulsu*. Zgodnie ze znaną własnością funkcji delta [57]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) dx = 1, \quad (4.314)$$

możemy wobec (4.313) napisać, że

$$M = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_s(x) dx. \quad (4.315)$$

Oznacza to, że wielkość M określa masę (lub energię cieplną), wprowadzoną do strumienia w chwili początkowej, odniesioną do jednostki przekroju poprzecznego tego strumienia.

W dokładnym ujęciu przypadek (4.313) jest nierealistyczny, gdyż odnosi się do funkcji, która dla $x = x_0$ dąży do nieskończoności, zaś dla $x \neq x_0$ przyjmuje wartości zerowe.

Jednakże stanowi ona bardzo *wygodny i pożyteczny model* sytuacji ważnych w praktyce, gdy w chwili początkowej na krótkim odcinku $\Delta x_M \rightarrow dx \rightarrow 0$ strumienia płynu (na przykład rzeki) rozprowadzona zostaje pewna masa substancji rozpuszczonej lub energii cieplnej, powodująca znaczny wzrost stężenia Δc_M (lub wzrost temperatury ΔT_M). Przyrost ten w opisywanym tu ujęciu traktuje się jako bardzo duży. Choć więc mamy świadomość, że przyjęcie relacji $\Delta c \rightarrow \infty$ oraz $\Delta T \rightarrow \infty$ jest dyskusyjnym przybliżeniem, to jednak w ramach omawianego tu modelu możemy wobec (4.315) przyjąć, że

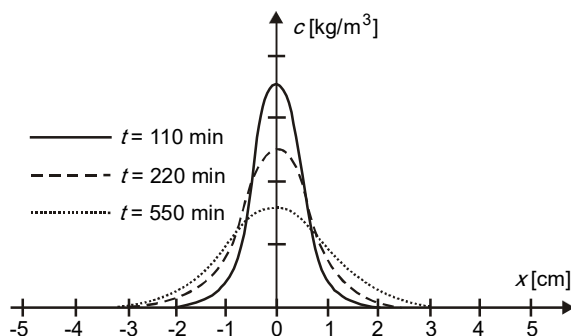
$$M \approx \Delta c_M \Delta x_M \text{ (lub } M \approx \Delta T_M \Delta x_M \text{)}. \quad (4.316)$$

Dzięki temu możemy ważne praktycznie przypadki (na przykład zrzuty awaryjne, o dużej koncentracji masy lub energii, a zlokalizowane na krótkim odcinku strumienia) potraktować jako opisane warunkiem (4.13), który wstawiony do (4.312) daje następującą relację:

$$s_p(x, t) = \frac{M}{2\sqrt{D_s \pi t}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4D_s t}\right]. \quad (4.317)$$

Stanowi ona podstawowe rozwiązanie równania nieustalonej dyfuzji, zarówno ze względów poznawczych, jak i praktycznych.

Przykładowe wykresy tej funkcji dla kolejnych wartości czasu, pokazano na rys. 4.41. Mają one bardzo charakterystyczny kształt (krzywa Gaussa, „krzywa dzwonowa”), pozwalający na ilustrację podstawowych cech procesu dyfuzji. Widać, że zgodnie z istotą procesu dyfuzji (powodowanego samorzutnym, molekularnym ruchem masy i energii z miejsc o większej ich koncentracji, do miejsc o niższej koncentracji – par. 4.4.2.) początkowy rozkład wielkości skalarnej (masy lub energii) ulega „spłaszczeniu”, z jednoczesnym wzrostem zasięgu.



Rys. 4.41. Dyfuzja w ośrodku nieruchomym (wg równ. (4.317)); $x_0 = 0$, $M = 350 \text{ kg/m}^3$, $D_s = 1,5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$

Przykład 4.6

Do wypełnionej nieruchomą wodą poziomej szklanej rury o średnicy $d = 50 \text{ mm}$ wprowadzono $V = 20 \text{ cm}^3$ nasyconego roztworu NaCl , tworząc w chwili początkowej ($t = 0$) w rejonie przekroju $x_0 = 0$ regularny walcowy „plaster” wody, zanieczyszczonej chlorkiem sodu. Wykorzystując omówiony wyżej model impulsowego zanieczyszczenia płynu (równanie (4.317)) opisać proces rozprzestrzeniania się NaCl w wodzie.

Rozwiązanie

Przyjmijmy, że wszystkie czynności zostały wykonane bardzo ostrożnie, wobec czego dopuszczalne jest posługiwanie się tu modelem jednowymiarowej dyfuzji. Aby wykorzystać relację (4.317) musimy określić intensywność impulsu, który jest modelem rzeczywistego sposobu wprowadzenia solanki. Z danych zadania wynika, że długość zawierającego solankę „plastra” wynosi

$$\Delta x_M = 4V/(\pi d^2) = 0,01 \text{ m.}$$

Skoro $c_n = 350 \text{ g/dm}^3$, to wobec (4.316) mamy $M = 35 \text{ g/dm}^2$, zaś $\Delta c_M = c_n$. Współczynnik dyfuzji molekularnej dla chlorku sodu wynosi $D_M = 0,0000000015 \text{ m}^2/\text{s}$.

Podstawiając powyższe wartości liczbowe do (4.317) otrzymujemy funkcję $c(x, t)$ dla rozważanego zagadnienia. Jej wykresy pokazano na rys. 4.41. Odpowiadają one kolejnym czasom $t_1 = 110$ minut, $t_2 = 220$ minut oraz $t_3 = 550$ minut. ■

Powyższy przykład pozwala na ocenę szybkości zmian stężenia, powodowanych przez dyfuzję molekularną. Jak widać, 4-krotny wzrost zasięgu obszaru zanieczyszczonego (z 1,0 cm do 4,0 cm) trwa tutaj niemal 2 godziny, zaś wzrost 6-krotny – prawie 4 godziny. Dla porównania zauważmy, że gdyby ciecz jednocześnie płynęła (ze stosunkowo niewielką) prędkością $v = 0,1 \text{ m/s}$, to obszar zanieczyszczony uległby w tym czasie przemieszczeniu o odpowiednio 660 m oraz 1320 m.

Wynika stąd niesłychanie istotny praktycznie wniosek. Mówi on, że dyfuzja molekularna jest w porównaniu z adwekcją procesem bardzo powolnym, ale powoduje wyraźne, istotne zmiany stężenia substancji rozpuszczonej (oraz odpowiednio rozkładu temperatury, jeśli rozważamy proces przenoszenia ciepła). Oznacza to, że musimy bezwarunkowo uwzględnić dyfuzję wtedy, gdy rozważamy migrację zanieczyszczeń w ośrodkach nieruchomych, lub poruszających się bardzo wolno. Można natomiast rozważać możliwość jej pomijania w ośrodkach o wyraźnej adwekcji. Jednakże tej ostatniej konkluzji nie możemy jeszcze traktować jako ostatecznej. Uprzednio musimy bowiem przedyskutować procesy pokrewne dyfuzji molekularnej (rozdz. 6 i 7).

Kolejny przypadek równania dwuczłonowego odnosi się do przebiegu *nieustalonych procesów źródłowych*. Równanie transportu ma wtedy postać

$$\frac{ds_p}{dt} = Z_s. \quad (4.318)$$

Oznacza to, że zjawisko musi przebiegać bez adwekcji i dyfuzji. W praktyce chodzi tu o przemiany (chemiczne, biologiczne oraz/lub fizyczne), zachodzące w układzie (najczęściej zbiorniku, który w tym przypadku nazywać będziemy *reaktorem*) o na tyle intensywnym mieszanii zawartości, że jej stężenie oraz/lub temperatura jest stała w tym układzie i zmienia się tylko w czasie. Bliżej procesy tego typu rozważać będziemy w rozdziale 9 (*model Streetera-Phelpsa*), toteż tutaj ograniczymy się tylko do najprostszego przypadku, gdy rozważamy zmianę w czasie stężenia pewnej substancji ($s_p = c$), ulegającej reakcji I rzędu, opisanej relacją (4.224). Zamiast (4.318) możemy wtedy napisać, że

$$\frac{dc}{dt} = -k_c c. \quad (4.319)$$

Jako warunek graniczny wystarczy tu przyjąć jeden warunek początkowy

$$c = c_0 \text{ dla } t = 0. \quad (4.320)$$

Rozdzielając w równaniu (4.319) zmienne, piszemy

$$\frac{dc}{c} = -k_c t. \quad (4.321)$$

Całkując to równanie, otrzymujemy rozwiązanie ogólne

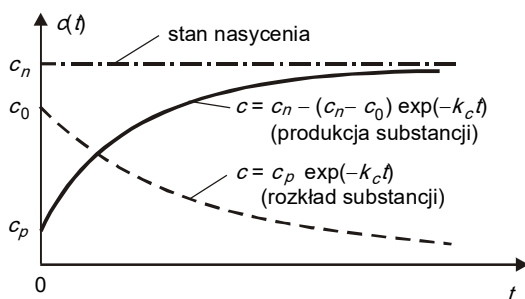
$$\ln c = -k_c t + C. \quad (4.322)$$

Stała całkowania wobec (4.320) jest równa

$$C = \ln c_0, \quad (4.323)$$

toteż szukana funkcja może być zapisana następująco (rys. 4.42):

$$c(t) = c_0 \exp(-k_c t). \quad (4.324)$$



Rys. 4.42. Wykładniczy przebieg procesów źródłowych I rzędu

To formalnie proste wyrażenie zawiera w sobie bardzo ważną informację. Mówi ono, że procesy źródłowe I rzędu (jak już powiedzieliśmy w par. 4.10.2, niesłychanie powszechnie występujące w naturze) mają *charakter wykładniczy* – zmiany stężenia są tu największe w początkowej fazie reakcji, a następnie sukcesywnie słabną. Istotną konsekwencją tego faktu jest znaczne wydłużanie się czasu przebiegu procesu (a tym samym wzrost kosztów jego realizacji) ze wzrostem jego efektywności.

Taki sam charakter ma ważny praktycznie proces wytwarzania substancji, którego szybkość jest proporcjonalna do deficytu jej stężenia (4.229), gdy

$$\frac{dc}{dt} = k_c (c_n - c). \quad (4.325)$$

Jak łatwo sprawdzić, rozwiązanie tego równania z warunkiem (4.320) ma postać funkcji (patrz rys. 4.42)

$$c(t) = c_n - (c_n - c_0) \exp(-k_c t). \quad (4.326)$$

4.12.2.4. Dwuczłonowe wersje równania ogólnego – stany ustalone. Czwarta dwuwymiarowa wersja równania transportu

$$v \frac{ds_p}{dx} = D_s \frac{d^2 s_p}{dx^2} \quad (4.327)$$

dotyczy już przepływu ustalonego (ponownie zastąpiliśmy więc pochodne cząstkowe przez pochodne zwyczajne, gdyż s_p jest teraz tylko funkcją zmiennej x). Opisuje ono *ustaloną dyfuzję z adwekcją* (bez procesów źródłowych). Również to równanie możemy rozwiązać analitycznie.

Przykład 4.7

Przyjmując, że woda w rowie, łączącym dwa zbiorniki (patrz przykład 4.5) płynie z prędkością v , wyznaczyć dla tego rowu rozkład stężenia substancji rozpuszczonej w wodzie.

Rozwiązanie

Podstawiając w równaniu (4.327), dla $s_p = c$ oraz $D_s = D_M$, funkcję pomocniczą

$$w = dc/dx,$$

otrzymujemy równanie pomocnicze

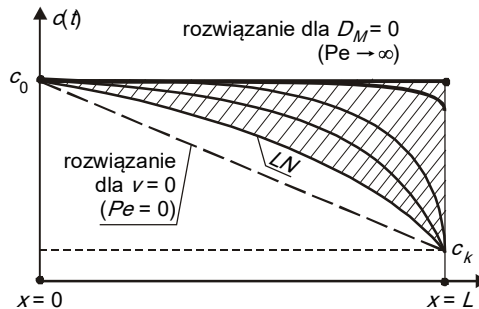
$$\frac{dw}{dx} = \frac{v w}{D_M}.$$

Po obliczeniu jednej kwadratury mamy

$$w = C_1 \exp\left(\frac{v x}{D_M}\right),$$

zaś po powtórnym całkowaniu otrzymujemy

$$c(x) = C_1 \frac{D_M}{v} \exp\left(\frac{v x}{D_M}\right) + C_2.$$



Rys. 4.43. Zmienność stężenia podczas ustalonej adwekcji z dyfuzją (przykłady 4.8 i 4.9)

Wykorzystując warunki brzegowe ($c = c_0$ dla $x = 0$ oraz $c = c_k$ dla $x = L$) możemy wyliczyć stałe całkowania i ostateczną postać szukanego rozwiązania zapisać jak następuje (rys. 4.43):

$$c(x) = c_0 - \frac{c_0 - c_k}{1 - \exp\left(\frac{v x}{D_M}\right)} [1 - \exp(v x / D_M)]. \quad (4.328)$$

Przykład 4.8

Korzystając z relacji (4.328), przedyskutować wzajemną proporcję między intensywnością adwekcji a intensywnością dyfuzji.

Rozwiązanie

Analizując przedstawione na rys. 4.43 linie, widzimy, że przy realistycznych wartościach prędkości ($\nu = 1,0$ m/s) i współczynnika dyfuzji molekularnej (D_M rzędu 10^{-9} m²/s, patrz tab. 6), funkcja (4.328) na niemal całym odcinku kanału zachowuje praktycznie niezmienną wartość c_0 , która dopiero w bezpośrednim sąsiedztwie prawego brzegu ($x = L$) ulega bardzo gwałtownemu zmniejszeniu do c_k (tak, aby spełniony był „prawy” warunek brzegowy).

Zauważmy, że w granicznym przypadku ($D_M = 0$) zamiast (4.327) mamy

$$\nu \frac{dc}{dx} = 0,$$

skąd

$$c = c_0 = \text{const} \neq c(x).$$

Wyraźne uzmiennienie wykresu $c(x)$ uzyskuje się dopiero ze wzrostem współczynnika dyfuzji molekularnej. Przykładowo, pokazany na rys. 4.43 wykres LN odpowiada wartości $D_M = 50,0$ m²/s (przy tej samej prędkości $\nu = 1,0$ m/s), co w teorii dyfuzji molekularnej jest wartością niedopuszczalnie wielką.

Oznacza to, że w typowych warunkach przenoszenie adwekcyjne jest o kilka rzędów wielkości bardziej intensywne niż dyfuzja molekularna. Ilościowa dyskusja równania (4.328) pozwala stwierdzić, że stosunek intensywności obu tych procesów określony jest przez bezwymiarowe wyrażenie, zwane *liczbą Pecleta* (relacja (4.277)). Gdy jej wartość jest bardzo duża (w granicy $Pe \rightarrow \infty$), dyfuzja ma małe znaczenie (i tak jest z reguły w przypadku dyfuzji molekularnej), zaś dla małych wartości Pe (w granicy dla $Pe = 0$) – adwekcja nie ma znaczenia w porównaniu z dyfuzją (co odpowiada dyfuzji w ośrodku nieruchomym). Ten sam wniosek sformułowaliśmy już zresztą wcześniej, dyskutując rozwiązanie równania nieustalanej dyfuzji (patrz komentarz po przykładzie 4.6). ■

Przykład 4.9

Określić błąd, powodowany wprowadzeniem do równania (4.327) na brzegu $x_k = L$ przybliżonego warunku brzegowego (4.276).

Rozwiązanie

W powyższych przykładach stawialiśmy dla równania (4.327) na obu brzegach ($x_0 = 0$ oraz $x_k = L$) warunki Dirichleta. Jak już jednak stwierdziliśmy (patrz pkt 4.11.4.2), warunek tego typu na brzegu prawym („odpływowym”) z reguły trudno jest określić. Nie znamy tam również dokładnej wartości pochodnej stężenia (warunek Neumanna), toteż w praktyce stosuje się uproszczenie, zgodnie z którym

$$\frac{\partial c}{\partial x} = 0 \text{ dla } x_k = L.$$

Wyznamy teraz stałe C_1 i C_2 w rozwiązaniu ogólnym (przykład 4.8), przyjmując na brzegu lewym $c = c_0$, zaś omawiany tu przybliżony warunek Neumanna na brzegu prawym. W prosty sposób stwierdzamy, że mamy teraz

$$C_1 = 0, C_2 = c_0,$$

czyli zamiast (4.328) otrzymujemy rozwiązanie

$$c = c_0 = \text{const} \neq c(x).$$

Korzystając z wykresów na rys. 4.43 widzimy, że jako miarę błędu, powodowanego uproszczonym warunkiem brzegowym, możemy przyjąć pole powierzchni F_B , pomiędzy rozwiązaniem uproszczonym $c = c_0$ a odpowiednim wykresem $c(x)$, zakreskowane na tym rysunku. Jest ono równe

$$F_B = \int_0^L [c_0 - c(x)] dx.$$

Po wykonaniu prostych obliczeń, odnosząc wartości F_B do maksymalnych wartości tego pola $F_{bmax} = (c_0 - c_k)L$, otrzymujemy

$$F_B/F_{bmax} = \frac{1 - \exp Pe + Pe}{Pe(1 - \exp Pe)}$$

Zauważmy, że dla $Pe = 0$ określony powyższym wzorem błąd względny dąży do 50% (co odpowiada rozwiązaniu (4.294) dla $v = 0$ – linia przerywana na rys. 4.43), zaś dla $Pe \rightarrow \infty$ – błąd dąży do zera (rozwiązanie dla $D_M = 0$ – linia pozioma na rys. 4.43). Aby otrzymać te wyniki, należy dla ostatniej formuły dwukrotnie zastosować regułę de l’Hospitála [53]. Dla wartości pośrednich Pe uzyskujemy wyniki bardzo bliskie pokazanym na rys. 4.34 (choć odnoszą się one do przepływu turbulentnego, omówionego w rozdz. 6, zaś tu rozważamy prosty przykład zjawiska ustalonego w czasie). □

Kolejna z rozważanych tu relacji ma postać

$$v \frac{ds_p}{dx} = Z_s. \quad (4.329)$$

Opisuje ona *ustaloną adwekcję substancji niezachowawczej* (bez dyfuzji) i wykazuje pewne podobieństwo do równania (4.318), z tą różnicą, że tam zmienną niezależną jest czas, różnicujący kolejne stany reaktora, podczas gdy tutaj zmienną taką jest współrzędna przestrzenna. Jeżeli przyjmiemy, że funkcja Z_s opisuje reakcję I rzędu, to

$$s_p(x) = s_{p0} \exp(-k_s x) \quad (4.330)$$

(patrz rozwiązanie równania (4.318)). Tak więc rozkład wartości s_p wzdłuż strumienia dany jest funkcją wykładniczą. Bliżej omówimy ten typ procesu w rozdz. 9 (*model Streetera-Phelpsa*).

Ostatnia z dwuczłonowych relacji, czyli równość

$$D_s \frac{d^2 s_p}{dx^2} + Z_s = 0 \quad (4.331)$$

opisuje *ustaloną dyfuzję z jednoczesnymi przemianami źródłowymi*. Jeśli także tutaj przyjmujemy model reakcji I rzędu, to mamy równanie różniczkowe zwyczajne, liniowe, jednorodne, rzędu drugiego, o stałych współczynnikach

$$\frac{d^2 c}{dx^2} - \frac{k}{D_M} c = 0. \quad (4.332)$$

W prosty sposób rozwiążemy je analitycznie, ale uprzednio dokonajmy istotnego oszacowania, dotyczącego proporcji między szybkością rozkładu substancji (stała k) oraz szybkością dyfuzji (współczynnik D_M). Zauważmy, że gdy $k \gg D_M$, wtedy

$$\frac{d^2 c}{dx^2} \ll \frac{k}{D_M} c.$$

Upoważnia nas to do pominięcia członu dyfuzyjnego i prowadzi w konsekwencji do wniosku, że rozwiązanie (4.332) ma w tym przypadku postać relacji $c = 0$. Jest to w pełni zgodne z fizycznym sensem rozważanego przypadku, gdyż wobec nierówności $k \gg D_M$ substancja rozpuszczona ulega bardzo szybkiemu rozkładowi i w efekcie jej stężenie spada do zera.

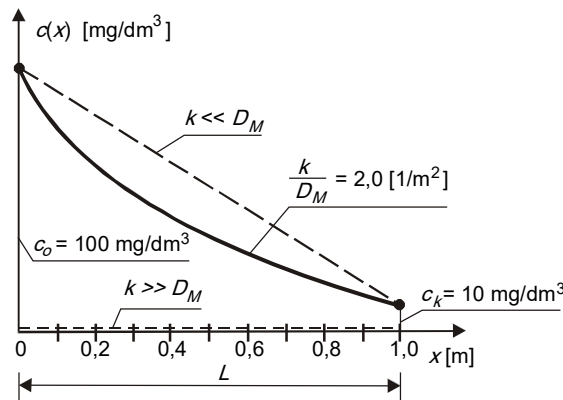
Z drugiej strony możemy mieć przypadek, gdy $k \ll D_M$, a wtedy możemy odrzucić człon źródłowy i równanie (4.332) przyjmuje postać (4.292), której rozwiązaniem jest funkcja (4.294).

Dwa wyżej omówione wyrażenia – liniowa funkcja (4.294) oraz prosta relacja $c = 0$ – określają graniczne stany równania (4.332). Sytuacje pośrednie opisuje zaś jego rozwiązanie ogólne

$$c(x) = C_1 \exp\left(\sqrt{\frac{k}{D_M}} x\right) + C_2 \exp\left(-\sqrt{\frac{k}{D_M}} x\right), \quad (4.333)$$

którego uzyskanie jest bardzo proste (np. [53]). Stałe całkowania C_1 i C_2 wyznaczymy z warunków brzegowych. Jeżeli są to warunki Dirichleta, jak w przykładzie 4.7, wtedy całka szczególna (4.332) ma następującą postać:

$$c(x) = \frac{c_0 \exp\left(\sqrt{\frac{k}{D_M}} L\right) - c_k}{\exp\left(\sqrt{\frac{k}{D_M}} L\right) - \exp\left(-\sqrt{\frac{k}{D_M}} L\right)} \exp\left(-\sqrt{\frac{k}{D_M}} x\right) + \frac{c_k - c_0 \exp\left(-\sqrt{\frac{k}{D_M}} L\right)}{\exp\left(\sqrt{\frac{k}{D_M}} L\right) - \exp\left(-\sqrt{\frac{k}{D_M}} L\right)} \exp\left(\sqrt{\frac{k}{D_M}} x\right). \quad (4.334)$$



Rys. 4.44. Wykres funkcji (4.334)

Przykładowy wykres tej funkcji przedstawiono na rys. 4.44 (wraz z dwoma rozwiązaniami granicznymi, omówionymi wyżej).

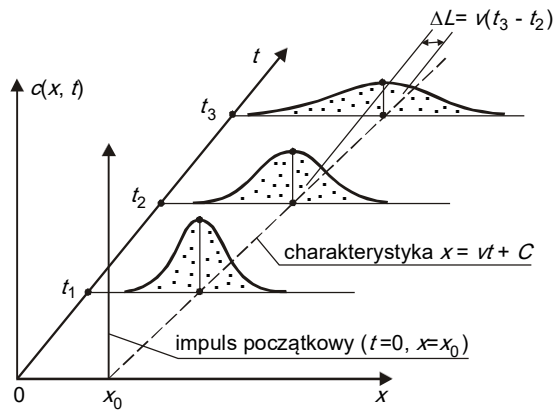
4.12.2.5. Trójczłonowe wersje równania ogólnego. W pierwszej kolejności rozważmy *równanie nieustalanej adwekcji z dyfuzją*

$$\frac{\partial s_p}{\partial t} + v \frac{\partial s_p}{\partial x} = D_s \frac{\partial^2 s_p}{\partial x^2}. \quad (4.335)$$

W realnych sytuacjach, gdy warunki początkowe (par. 4.11.3) i brzegowe (par. 4.11.4) wyrażone są przez funkcje odpowiadające rzeczywistym procesom (a więc z reguły skomplikowane), można je rozwiązać za pomocą metod numerycznych (patrz par. 4.12.4). Jednakże w szczególnym przypadku, gdy możemy rozważać zagadnienie początkowe (dany jest warunek początkowy w obszarze nieograniczonym w postaci impulsu – pkt 4.12.2.3, relacja (4.301)), a prędkość adwekcji v jest stała, można w prosty sposób uogólnić (4.317), otrzymując następujące rozwiązanie równania (4.335) [146]:

$$s_p(x, t) = \frac{M}{2\sqrt{D_s \pi t}} \exp\left[-\frac{(x - x_0 - vt)^2}{4D_s t}\right]. \quad (4.336)$$

Funkcja ta stanowi kombinację rozwiązań (4.299) i (4.317) – początkowy rozkład ulega tu adwekcyjnemu przemieszczeniu wzdłuż charakterystyki z prędkością v oraz jednoczesnemu dyfuzyjnemu „spłaszczeniu”. Ilustruje to rys. 4.45.



Rys. 4.45. Rozwiązanie równania nieustalanej adwekcji-dyfuzji w obszarze nieograniczonym wg (4.336)

Jako drugi przypadek w tym punkcie rozważmy proces *nieustalanej adwekcji substancji rozkładalnej*, opisany równaniem

$$\frac{Ds_p}{Dt} = \frac{\partial s_p}{\partial t} + v \frac{\partial s_p}{\partial x} = Z_s. \quad (4.337)$$

Łączy ono cechy zależności (4.297) i (4.318). Znając już rozwiązania tych ostatnich, możemy spodziewać się, że (4.337) opisuje przemieszczanie wartości s_p (stężenia lub tempera-

tury) wzdłuż charakterystyk $dx/dt = v$, z jednoczesnym jej spadkiem (gdy $Z_s < 0$) lub wzrostem (gdy $Z_s > 0$). Bliżej ten typ relacji rozważymy w rozdz. 9 (równanie *Streetera-Phelpsa*).

Kolejną wersją modelu trójczłonowego niech będzie równanie *nieustalonej dyfuzji substancji rozkładalnej* (bez adwekcji)

$$\frac{\partial s_p}{\partial t} = D_s \frac{\partial^2 s_p}{\partial x^2} + Z_s. \quad (4.338)$$

Przykładem jego zastosowania może być zadanie, polegające na opisie działania *reaktora okresowego* (będącego przeciwieństwem *reaktora przepływowego*, dla którego $v \neq 0$). Rozwiązanie tego typu problemu można znaleźć w literaturze (np. [20]), lub wyznaczyć metodami przybliżonymi (analitycznymi lub numerycznymi).

Ostatnim z rozważanych tu przypadków jest *ustalona adwekcja i dyfuzja substancji rozkładalnej*, opisana następującą relacją:

$$v \frac{ds_p}{dx} = D_s \frac{d^2 s_p}{dx^2} + Z_s. \quad (4.339)$$

Jeżeli człon źródłowy Z_s opisany jest prostą funkcją, także tutaj możemy poszukiwać rozwiązania w postaci analitycznej. Zakładając typową reakcję I rzędu, relacja (4.339) przyjmie postać równania różniczkowego liniowego, jednorodnego, rzędu drugiego, o stałych współczynnikach. Jak łatwo sprawdzić (np. [53]), ma ono rozwiązanie analityczne formalnie identyczne z rozwiązaniem (4.333) (zaś (4.334) dla warunków brzegowych Dirichleta) równania (4.332). Różnica polega jedynie na tym, że zamiast czynnika

$$\sqrt{k_s/D_s}$$

należy wstawić tam wyrażenie

$$\sqrt{4k_s/D_s + v^2/D_s^2}.$$

4.12.2.6. Pełna wersja równania ogólnego. Jeżeli nie mamy podstaw do odrzucenia któregoś z członów ogólnego równania transportu, czyli gdy wszystkie cztery czynniki:

- 1) zmienność zjawiska w czasie,
- 2) adwekcja,
- 3) dyfuzja molekularna,
- 4) procesy źródłowe

są równie istotne, proces w przypadku jednowymiarowym i jednokierunkowym opisany jest relacją (4.289).

Dla zagadnienia początkowego (4.313) jej rozwiązanie ma postać [15]

$$s_p(x, t) = \frac{M}{2\sqrt{D_s \pi t}} \exp \left[-\frac{(x - x_0 - vt)^2}{4D_s t} - kt \right] \quad (4.340)$$

W bardziej złożonych przypadkach (w szczególności – w obszarze ograniczonym) równanie (4.289) musi być rozwiązywane metodami przybliżonymi. Kwestię tę podejmiemy później, po omówieniu istotnych problemów, związanych z wyznaczaniem pola prędkości adwekcji \mathbf{u} (rozdz. 6 – turbulencja, rozdz. 7 – uśrednianie względem zmiennych przestrzennych).

4.12.2.7. Inne analityczne rozwiązania równania transportu. W poprzednich punktach tego paragrafu przedstawiliśmy pewną liczbę analitycznych rozwiązań, odnoszących się do szczególnych wersji ogólnego równania transportu. Mają one charakter przykładów, o dużych walorach zarówno poznawczych, jak też metodycznych i praktycznych. A chociaż uzyskiwanie takich rozwiązań jest rzeczą trudną, możliwą tylko w prostych sytuacjach, to nie wyczerpaliśmy wszystkich przypadków, jakie znaleźć można w literaturze zagadnienia. Poniżej omówimy więc jeszcze kilka istotnych przypadków, które mogą być przydatne przy opisie migracji zanieczyszczeń.

W pierwszej kolejności wróćmy do ważnego równania (4.301). Odnosi się ono do dyfuzji jednowymiarowej, lecz omówioną przy jego rozwiązywaniu metodę rozdzielania zmiennych można zastosować także do przypadku dwuwymiarowego (na nieograniczonej płaszczyźnie x_0y), gdy

$$\frac{\partial s_p}{\partial t} = D_s \left(\frac{\partial^2 s_p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 s_p}{\partial y^2} \right). \quad (4.341)$$

Jeżeli masa substancji zanieczyszczającej lub energia cieplna zostanie wprowadzona w punkcie (x_0, y_0) jako skoncentrowany impuls o intensywności M , to równanie (4.341) spełnia funkcja [53, 110]

$$s_p(x, y, t) = \frac{M}{4D_s\pi t} \exp \left[-\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{4D_s t} \right]. \quad (4.342)$$

Wartość M określa tu masę wprowadzonej substancji, odniesioną do jednostki grubości warstwy płynu, liczonej w kierunku osi $0z$. W przypadku energii cieplnej, wartość M określa wprowadzoną do płynu energię (w dżulach), podzieloną przez gęstość płynu, przez jego ciepło właściwe oraz przez głębokość warstwy płynu. Wykresem (4.342) jest zmienna w czasie powierzchnia o kształcie przypominającym dzwon, której przekrój osiowy jest identyczny z wykresem rozwiązania dla jednej zmiennej przestrzennej (rys. 4.41).

Podobnie dla przypadku trójwymiarowego w przestrzeni nieograniczonej, gdy

$$\frac{\partial s_p}{\partial t} = D_s \left(\frac{\partial^2 s_p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 s_p}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 s_p}{\partial z^2} \right), \quad (4.343)$$

rozwiązaniem jest funkcja

$$s_p(x, y, z, t) = \frac{M}{8(D_s\pi t)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2}{4D_s t} \right] \quad (4.344)$$

Intensywność impulsu w tym przypadku określa masę substancji rozproszonej, lub odpowiednio energię cieplną, podzieloną przez gęstość i ciepło właściwe płynu.

Przydatny do naszych celów może też być przypadek nagłego zwiększenia stężenia roztworu (lub temperatury płynu), określonego przez warunek początkowy (dla $t = 0$)

$$s_p = s_{p0}, \text{ gdy } x - x_0 < 0; s_p = 0, \text{ gdy } x - x_0 > 0, \quad (4.345)$$

gdy płyn porusza się z prędkością v . Rozwiązanie równania (4.301) ma wtedy postać [15]

$$s_p(x, t) = 0,5 s_{p0} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - x_0 - vt}{2\sqrt{D_s t}} \right) + \exp \frac{vx}{D_s} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - x_0 + vt}{2\sqrt{D_s t}} \right) \right] \quad (4.346)$$

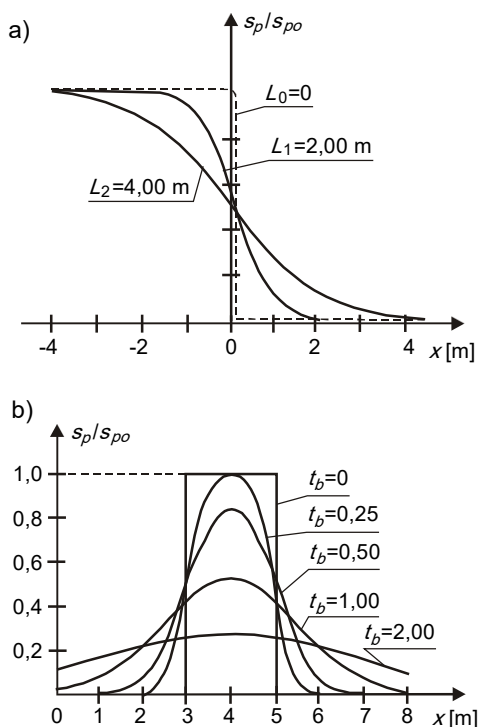
gdzie uzupełniająca funkcja błędu $\operatorname{erfc}(R)$ określona jest relacją

$$\operatorname{erfc}(R) = 1 - \operatorname{erf}(R), \quad (4.347)$$

zaś [93]

$$\operatorname{erf}(R) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^R \exp(-y^2) dy. \quad (4.348)$$

Przykładowy przebieg funkcji $s_p(x, t)$ według (4.346) pokazano na rys. 4.46a.



Rys. 4.46. Szczególne rozwiązania równania transportu zanieczyszczeń (a – funkcja (4.344) dla $x_0 = 0$, $v = 0$, $L = (D_s t)^{1/2}$; b – funkcja (4.348) dla $x_0 = 4,0$ m, $v = 0$, $d = 1,0$ m, $t_b = L/d$)

Praktyczne walory ma również rozwiązanie dla początkowego rozkładu stężenia w postaci prostokąta, określonego następującym warunkiem początkowym:

$$t = 0: s_p = s_{p0}, \text{ gdy } -d < (x - x_0) < +d, \quad s_p = 0, \text{ gdy } |x| > d. \quad (4.349)$$

Ma ono postać funkcji (rys. 4.46b)

$$s_p(x, t) = 0,5s_{p0} \left[\operatorname{erf} \frac{d-x+x_0+vt}{2\sqrt{D_s t}} + \operatorname{erf} \frac{d+x-x_0-vt}{2\sqrt{D_s t}} \right] \quad (4.350)$$

W literaturze poświęconej problemom wymiany masy i energii (zorientowanym nie tylko na aspekty ekologiczne, ale także fizyczne i przemysłowe) znaleźć można jeszcze znaczną liczbę analitycznych rozwiązań równań transportu. Przeważnie opisują one procesy zachodzące w układach regularnych, spotykanych w technice. Jednakże ze względu na fakt, że tutaj interesują nas procesy przebiegające w układach naturalnych, o skomplikowanych kształtach, typowych dla naturalnego środowiska człowieka, nie będziemy tych rozwiązań analizowali, odsyłając zainteresowanego Czytelnika do publikacji specjalistycznych (np. [15, 20, 57, 78, 146]).

4.12.2.8. Uwagi praktyczne o analitycznych rozwiązaniach równania transportu zanieczyszczeń. Omówione dotychczas rozwiązania przynoszą dwa zasadnicze pożytki. Pierwszy z nich ma charakter metodyczny – każdy z rozważanych przypadków pozwala prześledzić zarówno sam sposób stawiania zagadnienia (co ma kapitalne znaczenie, jeżeli chcemy omawiane równania zastosować do rozwiązywania problemów technicznych), jak i proces uzyskiwania funkcji spełniających te równania.

Równie (a może i bardziej) istotny jest praktyczny aspekt otrzymanych wyrażeń. Stanowią one mianowicie gotowe formuły, opisujące rozkłady stężeń oraz/lub temperatury dla prostych, ale spotykanych w rzeczywistości, zagadnień technicznych. Jednakże na obecnym etapie naszych rozważań te praktyczne możliwości należy wykorzystywać ostrożnie.

Zastrzeżenie to wynika z faktu, że konkretne oszacowania liczbowe (patrz przykłady 4.6 i 4.8) wskazują, iż proces dyfuzji molekularnej przebiega niesłychanie wolno, w porównaniu z przenoszeniem adwekcyjnym. Oszacowanie takie może w pracy inżynierskiej stanowić dobrą podstawę do decyzji o odrzuceniu członów o mniejszym znaczeniu (w tym przypadku – do odrzucenia członów dyfuzyjnych). Byłaby to atrakcyjna możliwość, gdyż pominięcie dyfuzji molekularnej (lub odpowiednio molekularnego przewodzenia ciepła) oznacza uproszczenie zagadnienia (w związku z obniżeniem rzędu równań potrzebujemy mniej warunków brzegowych), a często także ułatwienie procesu jego rozwiązywania. Musimy jednak pamiętać, że dyskutowana tu sytuacja wymaga dokładnego wyznaczenia pola prędkości adwekcji u . Tymczasem, jak wiemy z kursu mechaniki płynów (np. [101]), jest to niesłychanie trudne, a w praktyce (ze względu na turbulencję przepływu) wręcz niemożliwe.

Ubiegając nieco dalsze rozważania zaznaczymy więc, że w działalności inżynierskiej będziemy stosowali różne postacie uproszczonych modeli pola prędkości. W konsekwencji (patrz rozdz. 6 i 7) człony typu dyfuzyjnego nabiorą innego znaczenia i nie będziemy mogli ich odrzucać.

Jednakże zanim przejdziemy do uproszczonych modeli transportu, poświęćmy nieco uwagi innym niż analityczne metodom rozwiązywania interesujących nas zagadnień.

4.12.3. Przybliżone metody analityczne

Istotą tej kategorii metod jest poszukiwanie rozwiązania rozważanego zagadnienia w postaci funkcji o z góry zadanej postaci ogólnej. Najczęściej określa ją jakiś szereg funkcyjny. Współczynniki w takim ogólnym wyrażeniu dobiera się tak, aby spełnione były zarówno rozważane równanie, jak i zadane warunki graniczne.

W literaturze zagadnienia znaleźć można dużo odmian metod należących do tej kategorii (np. metoda Cauchy'ego [53], metoda kollokacji [66], metoda Ritza [77] i wiele innych). Jednakże w dobie powszechnego stosowania maszyn liczących, przybliżone metody analityczne używane są raczej rzadko. Może nawet zbyt rzadko, jeśli weźmie się pod uwagę formalne możliwości, jakich te metody dostarczają. Ogólna analiza rozwiązań w postaci analitycznej jest bowiem zawsze łatwiejsza, niż w przypadku rozwiązań numerycznych. Ważne jest też, iż z rozwiązań analitycznych (nawet przybliżonych) bez trudu uzyskuje się liczbową lub graficzną postać funkcji, podczas gdy działanie odwrotne jest kłopotliwe i pracochłonne. Ponadto, właśnie istnienie komputerów upraszcza procedury obliczeniowe, związane z wyznaczaniem współczynników poszukiwanej funkcji. Przyczyną takiego stanu rzeczy są zapewne problemy ze spełnieniem warunków brzegowych, gdyż bardzo trudno jest opisać analitycznie złożone wartości funkcji wzdłuż nieregularnego z natury brzegu obszaru.

4.12.4. Metody numeryczne

Metody numeryczne stanowią podstawowe narzędzie przybliżonego rozwiązywania równań fizyki matematycznej. Zarówno wielkości dane, jak i wyniki, są tu *liczbami*. Jest to zasadnicza cecha tej grupy metod. Pozwala ona na szerokie wykorzystanie do obliczeń maszyn cyfrowych, co jest jednym z podstawowych czynników przemawiających za ich popularnością.

Ciągi liczb mają z definicji charakter dyskretny (są policzalne). Tymczasem równania różniczkowe, stanowiące bazę fizyki matematycznej, odnoszą się do ośrodków ciągłych. Aby więc zastosować do tego typu problemów metody numeryczne, należy dokonać *dyskretyzacji*, zarówno obszaru, w którym poszukujemy rozwiązania (rys. 4.29), jak i samych równań. Sposób przeprowadzenia tej dyskretyzacji jest zasadniczym wyróżnikiem poszczególnych metod obliczeniowych.

W praktyce do numerycznego rozwiązywania równań stosuje się dwa rodzaje podejść: *metodę różnic skończonych* albo *metodę elementów skończonych*.

Czytelnicy, pragnący samodzielnie tworzyć algorytmy i procedury obliczeniowe, muszą sięgnąć do literatury specjalistycznej, bardzo obszernej, poświęconej metodom numerycznym (np. [18, 38, 43, 66, 77, 103, 151, 157]). Wobec powyższego, szczegółów numerycznego rozwiązywania równań nie będziemy tu omawiali.

4.12.5. Metody graficzne

Wykreślne metody rozwiązywania równań różniczkowych mają marginalne znaczenie praktyczne, lecz ich zaletą jest obrazowe przedstawienie pewnych aspektów zarówno sposobu stawiania zagadnienia, jak też procesu powstawania jego rozwiązania. Z tego względu dobrze będzie poświęcić im nieco uwagi.

Poniżej przedstawimy graficzną *metodę Schmidta* [57], która pozwala na przybliżone wyznaczenie wykresu funkcji $s_p(x, t)$, spełniającej równanie jednowymiarowej dyfuzji nieustalanej (4.301) z warunkiem brzegowym Dirichleta. Ten przybliżony wykres ma charakter rodziny linii łamanych, określających wartości szukanej funkcji dla kolejnych chwil czasu.

Metoda ta bazuje na różnicowej aproksymacji pochodnych cząstkowych szukanej funkcji (co stanowi także podstawę wspomnianej już metody różnic skończonych), zgodnie z którą

$$\frac{\partial s_p}{\partial t} \approx \frac{s_{p,i+1,j} - s_{p,i,j}}{\Delta t}, \quad (4.351)$$

zaś

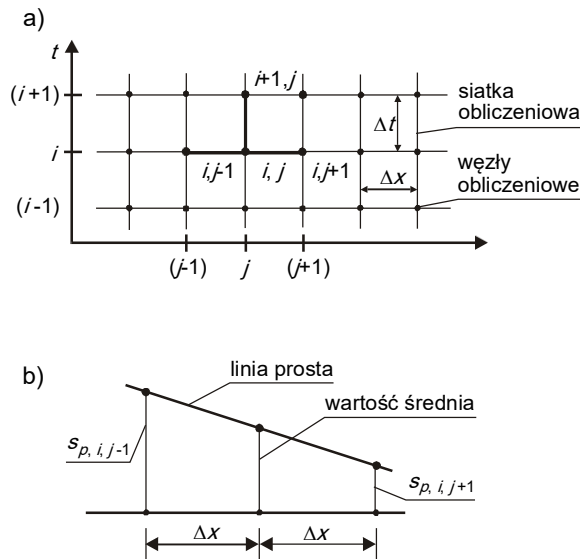
$$\frac{\partial^2 s_p}{\partial x^2} \approx \frac{s_{p,i,j+1} - 2s_{p,i,j} + s_{p,i,j-1}}{\Delta x^2} \quad (4.352)$$

Sposób zmiany wskaźników (i – wzdłuż osi czasu, j – wzdłuż osi $0x$) ilustruje rys. 4.47a. Podstawiając dwie ostatnie relacje do (4.301) i wykonując oczywiste przekształcenia algebraiczne, otrzymamy następującą relację:

$$s_{p,i+1,j} = Cr_d (s_{p,i,j+1} + s_{p,i,j-1}) + (1 - 2Cr_d) s_{p,i,j}, \quad (4.353)$$

gdzie symbol Cr_d oznacza *dyfuzyjną liczbę Couranta* [157]

$$Cr_d = \frac{D_s \cdot \Delta t}{\Delta x^2}. \quad (4.354)$$



Rys. 4.47. Schematy pomocnicze do graficznej metody Schmidta ($i = 0, 1, \dots, I$, $j = 0, 1, \dots, J$)

Ograniczmy się teraz do przypadku szczególnego, gdy $Cr_d = 0,5$. Oznacza to, że kolejne łamane linie otrzymywać będziemy w odstępach czasu Δt , określonych przez uprzednio przyjęty krok przestrzenny Δx oraz przez współczynnik transportu, zgodnie ze wzorem

$$\Delta t = \Delta x^2 / 2D_s. \quad (4.355)$$

Założenie to pozwala na uproszczenie (4.353) do postaci

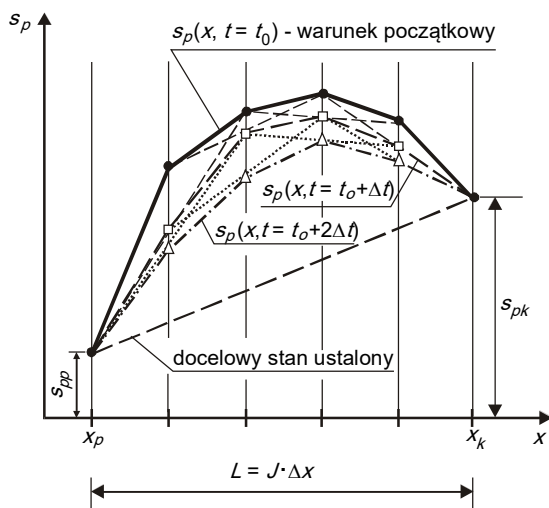
$$s_{p,i+1,j} = 0,5 (s_{p,i,j+1} + s_{p,i,j-1}). \quad (4.356)$$

Tak więc wartość szukanej funkcji w przekroju $x = j \Delta x$ i w czasie $t = (i + 1) \Delta t$ jest równa średniej arytmetycznej z dwóch jej wartości sąsiednich na niższym poziomie czasowym. Jest to dla omawianej tu metody stwierdzenie zasadnicze, gdyż wartość średniej możemy w prosty sposób wyznaczyć graficznie. Jest ona bowiem określona przez punkt przecięcia prostej, łączącej rzędne rozważanej funkcji w punktach $(j - 1)$ oraz $(j + 1)$, z odnoszącą $x = j \Delta x$ (rys. 4.47b).

Sposób postępowania przy rozwiązywaniu zagadnienia jest następujący (rys. 4.48):

- 1) przyjmujemy prostokątny układ współrzędnych $(x_0 s_p)$;
- 2) interesujący nas odcinek $L = x_k - x_p$ osi $0x$ dzielimy na J równych części o długości $\Delta x = L/J$ każda;
- 3) zaznaczamy punkty wykresu funkcji, odpowiadające niezmiennemu w czasie obliczeń warunkowi brzegowemu (rzędne s_{pp} oraz s_{pk} na rys. 4.48) oraz warunkowi początkowemu;
- 4) łączymy roboczymi liniami każdą parę co drugich punktów, wyznaczając zgodnie z rys. 4.47b nowe punkty, określające przybliżone rozwiązanie po upływie czasu Δt według relacji (4.355);
- 5) czynności opisane w ostatnim punkcie powtarzamy dowolną liczbę razy, otrzymując przybliżone rozwiązanie dla kolejnych wartości czasu $(i \Delta t)$.

Zauważmy, że kolejne linie łamane dążą do odcinka prostego (linia przerywana na rys. 4.48), który jest wykresem rozwiązania analitycznego dla stanu ustalonego (4.294). Tak więc omawiany tu wynik przybliżony dąży do wartości dokładnej.



Rys. 4.48. Zastosowanie graficznej metody Schmidta ($J = 5$)

5. UPRASZCZANIE RÓWNAŃ METODY FENOMENOLOGICZNEJ

5.1. Metodyka upraszczania równań

W rozdziale 4. sformułowane zostały równania różniczkowe, tworzące *bazowy układ równań metody fenomenologicznej*. Traktujemy je jako równania dokładne, choć z tym zastrzeżeniem, że podczas ich wyprowadzania musieliśmy przyjmować pewne założenia. Bez akceptacji bowiem tych uproszczeń, wyprowadzenie relacji o walorach użytkowych nie byłoby możliwe. Innymi słowy mamy świadomość, że ogólna teoria interesujących nas procesów nie istnieje, skutkiem czego musimy posługiwać się *modelami rzeczywistości*.

Drugi typ uproszczeń, z którymi dotychczas mieliśmy do czynienia, wynikał z racjonalnej chęci wyważenia kompromisu pomiędzy nakładem pracy, niezbędnym do uzyskania rozwiązania rozważanych równań, a dokładnością tego rozwiązania. W tym aspekcie analizowaliśmy wpływ poszczególnych zjawisk na *formę* (czyli postać zapisu matematycznego) oraz na *treść* (czyli na znaczenia fizyczne) naszego modelu. W rezultacie uzyskaliśmy układ równań o charakterze roboczym (patrz podrozdział 4.7).

Układ ten ma już pełne walory użytkowe, to znaczy umożliwia formułowanie realnych, spotykanych w technice, zagadnień oraz ich rozwiązywanie. Jednakże nakład pracy, niezbędny dla postawienia zadania i uzyskania jego rozwiązania, jest bardzo duży. Z tego względu jesteśmy bardzo zainteresowani wszelkimi możliwościami upraszczania tych równań.

Najbardziej oczywistym czynnikiem, pozwalającym na odrzucenie pewnych członów w rozważanych przez nas zależnościach, jest stopień przestrzennej złożoności rozważanych procesów. Jego wyrazem jest *liczba niezależnych zmiennych przestrzennych*, których funkcjami są poszczególne zmienne zależne, oraz *liczba niezerowych składowych wektora prędkości \mathbf{u}* . Jeżeli rozważane zjawisko opisywane jest wielkością fizyczną s_p (może to być skalar, lub składowa wielkości wektorowej albo tensorowej), to:

- gdy $s_p = s_p(x_1, x_2, x_3)$ – ma ono charakter *trójwymiarowy*,
- gdy $s_p = s_p(x_1, x_2)$ – ma ono charakter *dwuwymiarowy*,
- gdy $s_p = s_p(x_1)$ – ma ono charakter *jednowymiarowy*,
- gdy $s_p = \text{const}$ – ma ono charakter „*zerowymiarowy*”.

Z kolei ze względu na postać wektora mamy:

- gdy $\mathbf{u} = [u_1, u_2, u_3]$ – przepływ jest *trójkierunkowy*,
- gdy $\mathbf{u} = [u_1, u_2]$ – przepływ jest *dwukierunkowy*,
- gdy $\mathbf{u} = [u_1]$ – przepływ jest *jednokierunkowy*.

W powyższych wyrażeniach użyto symboli odnoszących się do dowolnego układu współrzędnych. Wybór tego układu ma duże znaczenie, gdyż często pozwala na uproszczenie opisu zjawiska. Przykładowo, punktowa eksplozja w obszarze jednorodnym generuje kulistą falę uderzeniową. W sferycznym układzie współrzędnych będziemy więc mogli opisać proces propagacji tej fali modelem jednowymiarowym i jednokierunkowym. Jeżeli zaś użyjemy układu kartezjańskiego, zjawisko będzie trójwymiarowe i trójkierunkowe.

Trzecim czynnikiem, który musimy tu uwzględnić, jest *czas*. Mamy dwie możliwości:

gdy $s_p = s_p(t)$ – proces jest *nieustalony*,

gdy $s_p \neq s_p(t)$ – proces jest *ustalony*.

Trzy powyższe klasyfikacje są od siebie niezależne, toteż formalnie tworzą dość znaczną liczbę możliwych kombinacji. Jednakże nie będziemy ich systematycznie analizować, gdyż każdorazowo wymaga to odniesienia do kontekstu badanego problemu.

Zauważyć natomiast trzeba, że przedstawione warunki stosunkowo rzadko spełnione są dokładnie. Dużo częściej natomiast mamy do czynienia z sytuacjami, w których liczba zmiennych niezależnych oraz/lub liczba składowych wektora prędkości może być zredukowana tylko z pewnym przybliżeniem. Możliwość taka musi być za każdym razem badana (w podrozdziale 4.12 rozważaliśmy co prawda uproszczone wersje równań bez takiego badania, lecz tam było to uzasadnione potrzebą ułatwienia lub wręcz umożliwienia rozwiązania zadania). Jednocześnie można wtedy ocenić wpływ wszystkich innych wielkości fizycznych, występujących w równaniach. Punktem wyjścia do takich oszacowań są *bezwymiarowe postacie równań transportu* (patrz podrozdziały 5.2 oraz 5.3).

Szacowanie wielkości poszczególnych członów równań zachowania jest metodą bazującą na jednolitej procedurze, lecz stosowaną do badania przypadków jednostkowych. Niezależnie od niej, w praktyce napotykamy też kilka ważnych klas uśrednień, dokonywanych na poziomie ogólnym, które automatycznie dotyczą wszystkich sytuacji, należących do danej kategorii. Są to:

- uśrednianie względem czasu, dla usunięcia turbulentnych fluktuacji zmiennych przepływu, prowadzące do pojęć *dyfuzji burzliwej* oraz *burzliwego przewodzenia ciepła* (rozdz. 6);
- uśrednianie względem części zmiennych przestrzennych, mające na celu uproszczenie rozkładów zmiennych przepływu, którego konsekwencją jest *proces dyspersji masy* oraz/lub *energii* (rozdz. 7);
- uśrednianie lokalnych odchyłek zmiennych przepływu, wywołanych obecnością ziarenek ośrodka porowatego, przez który przepływa ciecz, wprowadzające pojęcie *dyspersji hydrodynamicznej* lub *dyspersji w gruncie* (rozdz. 8);
- uproszczenie, polegające na odrzuceniu *a priori* członu dyfuzyjnego (*model typu Streetera-Phelpsa* – patrz rozdz. 9).

5.2. Bezwymiarowa postać równania transportu masy

Jako punkt wyjścia przyjmijmy równanie (4.194), które w układzie kartezjańskim ma postać (4.215). Zgodnie z generalną zasadą sprowadzania równań fizyki matematycznej do postaci bezwymiarowej [101, 178], każdą z występujących w takim równaniu wielkości fizycznych w_f przedstawiamy jako iloczyn *wymiarowej skali* tej wielkości W_{fs} oraz *bezwymiarowej zmiennej* w_{fb} , pisząc

$$w_f = W_{fs} w_{fb}. \quad (5.1)$$

Pierwszy z tych mnożników określa rząd wielkości, typowy dla wartości w_f , występujących w rozważanych zagadnieniach, natomiast drugi – opisuje względną zmienność tej wielkości. Określenie skali W_{fs} jest każdorazowo obarczone niejednoznacznością, związaną z subiektywizmem osoby stosującej tę metodę. Fakt ten świadomie akceptujemy, bowiem omawiamy tutaj nie precyzyjny sposób rozwiązywania problemu, lecz jedynie metodę porównawczego określania znaczenia pewnej liczby wyrażeń matematycznych.

Wprowadźmy następujące skale:

— *czasu*, pisząc

$$t = t_s t_b, \quad (5.2)$$

— *zmiennych przestrzennych* x_s, y_s oraz z_s , co daje

$$x = x_s x_b, y = y_s y_b, z = z_s z_b, \quad (5.3)$$

— *składowych prędkości* u_{xs}, u_{ys}, u_{zs} , pisząc

$$u_x = u_{xs} u_{xb}, u_y = u_{ys} u_{yb}, u_z = u_{zs} u_{zb}, \quad (5.4)$$

— *stężenia i -tej substancji rozpuszczonej* c_{is} , związanej z rzeczywistym stężeniem relacją

$$c_i = c_{is} c_{ib}, \quad (5.5)$$

— *j -ej funkcji źródłowej*, opisującej przemianę i -tej substancji rozpuszczonej, zgodnie z relacją

$$Z_{ij} = Z_{ijs} Z_{ijb}. \quad (5.6)$$

Podstawiając powyższe iloczyny do (4.194) i korzystając z możliwości wyłączenia stałej skali przed znak pochodnej, mamy

$$\begin{aligned} & \left(\frac{c_{is}}{t_s} \right) \frac{\partial c_{ib}}{\partial t_b} + \left(\frac{u_{xs} c_{is}}{x_s} \right) u_{xb} \frac{\partial c_{ib}}{\partial x_b} + \left(\frac{u_{ys} c_{is}}{y_s} \right) u_{yb} \frac{\partial c_{ib}}{\partial y_b} + \left(\frac{u_{zs} c_{is}}{z_s} \right) u_{zb} \frac{\partial c_{ib}}{\partial z_b} = \\ & = \left(\frac{D_{Mi} c_{is}}{x_s^2} \right) \frac{\partial^2 c_{ib}}{\partial x_b^2} + \left(\frac{D_{Mi} c_{is}}{y_s^2} \right) \frac{\partial^2 c_{ib}}{\partial y_b^2} + \left(\frac{D_{Mi} c_{is}}{z_s^2} \right) \frac{\partial^2 c_{ib}}{\partial z_b^2} + \sum_{j=1}^{I_r} [(Z_{ijs}) Z_{ijb}]. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Wyrażenia objęte nawiasami okrągłymi są utworzone ze skal, toteż każdy z nich ma wymiar $[M L^{-3} t^{-1}]$. Drugi mnożnik każdego ze składników sumy (5.7) jest już bezwymiarowy. Aby nadać charakter bezwymiarowy każdemu z członów tego równania, wystarczy je obustronnie podzielić przez jeden z wymiarowych mnożników. Zwyczajowo jako dzielnik wykorzystuje się tu mnożnik przy pierwszym z członów adwekcyjnych. Tak więc dzieląc (5.7) obustronnie przez

$$u_{xs} c_{is} / x_s,$$

otrzymujemy następującą relację:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{x_s}{t_s u_{xs}} \right) \frac{\partial c_{ib}}{\partial t_b} + u_{xb} \frac{\partial c_{ib}}{\partial x_b} + \left(\frac{u_{ys} x_s}{u_{xs} y_s} \right) u_{yb} \frac{\partial c_{ib}}{\partial y_b} + \left(\frac{u_{zs} x_s}{u_{xs} z_s} \right) u_{zb} \frac{\partial c_{ib}}{\partial z_b} = \\ & = \left(\frac{D_{Mi}}{u_{xs} x_s} \right) \frac{\partial^2 c_{ib}}{\partial x_b^2} + \left(\frac{D_{Mi} x_s u_{ys}}{u_{ys} y_s y_s u_{xs}} \right) \frac{\partial^2 c_{ib}}{\partial y_b^2} + \\ & + \left(\frac{D_{Mi} x_s u_{zs}}{u_{zs} z_s y_s u_{xs}} \right) \frac{\partial^2 c_{ib}}{\partial z_b^2} + \sum_{j=1}^{I_r} \left[\left(\frac{Z_{ijs} x_s}{u_{xs} c_{is}} \right) Z_{ijb} \right]. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Pierwszy z powstałych w ten sposób bezwymiarowych mnożników, stojący przed pochodną stężenia względem czasu, jest znaną z mechaniki płynów liczbą Strouhala Sh [101, 178]. Może ona być interpretowana na różne sposoby. Najbardziej czytelnym z nich jest uwypuklenie faktu, iż iloraz

$$x_s/u_{xs} = t_{ax} \quad (5.9)$$

określa charakterystyczny czas adwekcji płynu w kierunku osi $0x$, czyli mamy (patrz też (4.278))

$$Sh = x_s/(t_s u_{xs}) = t_{ax}/t_s. \quad (5.10)$$

Pamiętając, że wielkość t_s jest skalą czasu, określającą przeciętny czas zmiany warunków przebiegu zjawiska, możemy powiedzieć, że liczba Strouhala wyraża stosunek czasu pobytu masy w układzie oraz czasu zmiany warunków, panujących w tym układzie. Jeżeli więc

$$t_{ax} \gg t_s, \text{ czyli } Sh \gg 1, \quad (5.11)$$

to przepływający przez układ płyn „zdaży zauważyć” zmianę warunków, a więc *musimy uwzględnić niestacjonarność zjawiska*. W przeciwnym razie (gdy $Sh \ll 1$) – możemy odrzucić pochodną stężenia względem czasu i traktować zjawisko jako *ustalone*.

Dwa mnożniki, stojące przed członami adwekcyjnymi, stanowią kombinacje stosunków składowych prędkości oraz wymiarów geometrycznych. Wprowadźmy dla nich następujące oznaczenia:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{uxy} &= u_{xs}/u_{ys} & \alpha_{uxz} &= u_{xs}/u_{zs} \\ \alpha_{xy} &= x_s/y_s & \alpha_{xz} &= x_s/z_s \end{aligned} \right\}. \quad (5.12)$$

Te bezwymiarowe proporcje pojawiają się także w części członów dyfuzyjnych, gdzie występują w połączeniu z mnożnikiem, zawierającym współczynnik dyfuzji molekularnej. Aby ten ostatni zapisać w postaci zawierającej typowe dla mechaniki liczby podobieństwa, należy rozszerzyć ułamek przez kinematyczny współczynnik lepkości molekularnej płynu, pisząc

$$\frac{D_{Mi}}{u_{xs} x_s} = \frac{D_{Mi} \nu}{\nu u_{xs} x_s} = \frac{1}{Sc_i Re_x}. \quad (5.13)$$

Liczba Schmidta dla i -tej substancji rozpuszczonej

$$Sc_i = \frac{\nu}{D_{Mi}} \quad (5.14)$$

określa relację między podatnością płynu na molekularną wymianę pędu a molekularną wymianę masy (dyfuzję), zaś znana nam już liczba Reynoldsa Re została powyżej wyznaczona dla osi $0x$ (która z reguły sytuowana jest wzdłuż głównego kierunku ruchu)

$$Re_x = \frac{u_{xs} x_s}{\nu}. \quad (5.15)$$

Analogicznie definiujemy liczby Reynoldsa dla obu pozostałych kierunków:

$$Re_y = \frac{u_{ys} y_s}{\nu}, \quad Re_z = \frac{u_{zs} z_s}{\nu}. \quad (5.16)$$

Interesującą interpretację ma mnożnik w członie źródłowym. Aby ją uwidocznić, rozszerzmy to wyrażenie przez iloczyn $(y_s z_s)$, a następnie zauważmy, że iloczyn

$$u_{xs} y_s z_s c_{is} = Q_x c_{is} = m_{aixs} \quad (5.17)$$

określa rząd wielkości adwekcyjnego strumienia masy i -tej substancji rozproszonej w kierunku osi $0x$, który (jak już wyżej zaznaczyliśmy) zwyczajowo określa główny kierunek adwekcji. Z kolei w liczniku dyskutowanego teraz członu otrzymamy wyrażenie, opisujące ubytek (lub produkcję) masy i -tej substancji rozproszonej, powodowany przez j -tą reakcję, odniesiony do jednostki czasu. Możemy je zapisać następująco:

$$Z_{ijs} x_s y_s z_s = m_{zajs}. \quad (5.18)$$

Zestawiając dwie ostatnie relacje widzimy, że

$$\frac{Z_{ijs} x_s}{u_{xs} c_{is}} = \frac{m_{zajs}}{m_{aixs}} = \alpha_{zij} \quad (5.19)$$

oznacza stosunek szybkości ubytku (lub produkcji) masy wskutek przemian lub reakcji do szybkości jej adwekcyjnego przepływu. Gdy

$$\alpha_{zij} \gg 1, \quad (5.20)$$

wtedy człon źródłowy musimy w równaniu pozostawić. W przeciwnym razie ($\alpha_{zij} \ll 1$) można go odrzucić.

Ostatecznie więc relację (5.8) możemy zapisać w następującej postaci roboczej:

$$\begin{aligned} Sh \frac{\partial c_{ib}}{\partial t_b} + u_{xb} \frac{\partial c_{ib}}{\partial t_b} + \frac{\alpha_{xy}}{\alpha_{uxy}} u_{yb} \frac{\partial c_{ib}}{\partial y_b} + \frac{\alpha_{xz}}{\alpha_{uxz}} u_{zb} \frac{\partial c_{ib}}{\partial z_b} = \\ \frac{1}{Sc_i Re_x} \frac{\partial^2 c_{ib}}{\partial x_b^2} + \frac{\alpha_{xy}}{Sc_i Re_y \alpha_{uxy}} \frac{\partial^2 c_{ib}}{\partial y_b^2} + \frac{\alpha_{xz}}{Sc_i Re_z \alpha_{uxz}} \frac{\partial^2 c_{ib}}{\partial z_b^2} + \\ + \sum_{j=1}^{I_r} \alpha_{zij} Z_{ijb}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Umożliwia ona ocenę znaczenia poszczególnych członów równania ogólnego (4.194), zgodnie z ogólnymi zasadami stosowania tej metody [178], a w konsekwencji – daje podstawy do ewentualnego uproszczenia równania.

Często, szczególnie w zagadnieniach trójwymiarowych, skale poszczególnych składowych wektora prędkości oraz wymiarów geometrycznych są tego samego rzędu. Oznacza to, że:

$$\begin{aligned} \alpha_{uxy} = 1, \alpha_{uxz} = 1, \alpha_{xy} = 1, \alpha_{xz} = 1, \\ Re_x = Re_y = Re_z = Re. \end{aligned} \quad (5.22)$$

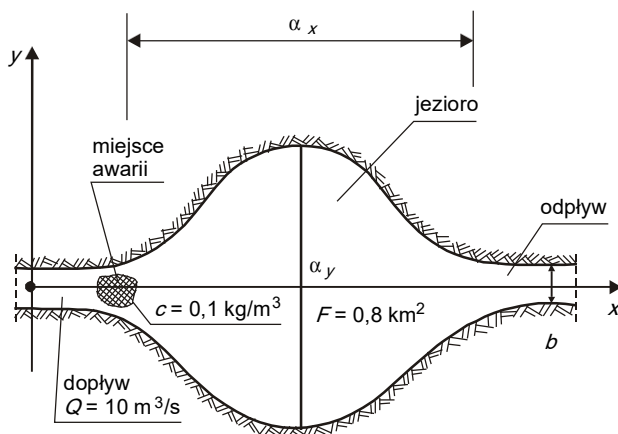
Równanie (5.21) przyjmuje wtedy postać prostszą, a mianowicie

$$Sh \frac{\partial c_{ib}}{\partial t_b} + (\mathbf{u}_b \nabla_b) c_{ib} = \frac{1}{Sc_i Re} \Delta_b c_{ib} + \sum_{j=1}^{I_r} \alpha_{zij} Z_{ijb} \quad (5.23)$$

Sposób posługiwania się wyżej omówionymi relacjami ilustruje przykład 5.1, przy czym ze względu na praktyczny sens wyniku przy jego prezentacji posłużono się pojęciem *dyfuzji burzliwej*, omówionej w rozdz. 6.

Przykład 5.1

W pobliżu ujściowego przekroju rzeki, przepływającej przez jezioro o głębokości średniej $H = 5,0$ m i polu powierzchni $F = 0,8$ km² (rys. 5.1), miał miejsce wyciek paliwa z jednostki pływającej. W rezultacie trwającej około 10 minut awarii, w wodzie rzecznej utworzyła się plama, składająca się z mieszaniny paliwa, wody i wprowadzonych środków ochronnych, neutralizujących związki ropopochodne. Normatywna szybkość działania tych środków wynosi $z_s = 0,00005$ kg/m³ · s. Początkowe stężenie zanieczyszczeń w mieszaninie jest równe 100 kg/m³. Wydatek rzeki wynosi $Q = 10,0$ m³/s, a jej głębokość i szerokość odpowiednio $h = 2,5$ m oraz $b = 10,0$ m.



Rys. 5.1. Schemat obliczeniowy do przykładu 5.1

Dobrać możliwie prostą postać równania migracji zanieczyszczeń, które opisywać będzie opisany wyżej przypadek.

Rozwiązanie

W ogólnym przypadku rozważany problem opisać można równaniem (4.194). Jednakże ze względu na omówiony już poziom trudności formalnych, przeanalizujemy możliwość uproszczenia tej zależności, korzystając z jej postaci bezwymiarowej (5.21).

W tym celu najpierw musimy ustalić skale poszczególnych wielkości fizycznych, a następnie – bezwymiarowe mnożniki, występujące w (5.21). Musimy przy tym pamiętać, że ze względu na rodzaj zjawiska mamy do czynienia z ruchem turbulentnym. Z tego względu współczynniki lepkości molekularnej oraz dyfuzji molekularnej w (5.21) musimy zastąpić przez odpowiednie współczynniki wymiany burzliwej (ν_T według (6.14) oraz D_T według (6.41)). Pozwala to zgodnie z (6.55) przyjąć $Sc_T = 0,85$.

Wobec regularnego kształtu jeziora można przyjąć, że

$$x_s = y_s = 1000,0 \text{ m,}$$

zaś

$$z_s = H = 5,0 \text{ m.}$$

Skala czasu, związana ze sposobem zakłócenia stanu wyjściowego, jest równa $t_s = 600$ s. Prędkość w ujściu rzeki wynosi

$$v_d = Q/(bh) = 0,4 \text{ m/s,}$$

natomiast prędkość średnia w najszerszym przekroju jeziora jest równa

$$v_c = Q/(BH) = 0,002 \text{ m/s.}$$

Jako skalę prędkości podłużnej u_{xs} przyjmijmy więc średnią z obu ostatnich wartości, czyli

$$u_{xs} = 0,2 \text{ m/s.}$$

Z kolei jako skalę prędkości poprzecznych można wybrać

$$u_{ys} = u_{zs} = v_c = 0,002 \text{ m/s.}$$

Skala stężenia z warunków zadania wynosi $c_s = 100 \text{ kg/m}^3$. Pozostaje jeszcze określić rząd wielkości współczynnika lepkości burzliwej. Wobec (6.55) możemy tu skorzystać z relacji (6.67). Przy prędkości średniej $u_{xs} = 0,2 \text{ m/s}$, prędkość dynamiczna (6.66) jest rzędu $v^* = 0,008 \text{ m/s}$ ($n_M = 0,016$), wobec czego

$$v_T = 0,0022 \text{ m}^2/\text{s.}$$

Możemy teraz obliczyć poszczególne mnożniki bezwymiarowe, co pozwala następująco zapisać równanie (5.21):

$$\begin{aligned} 8,33 \frac{\partial c_b}{\partial t_b} + u_{xb} \frac{\partial c_b}{\partial x_b} + 0,01 u_{yb} \frac{\partial c_b}{\partial y_b} + 2,00 u_{zb} \frac{\partial c_b}{\partial z_b} = \\ = 0,000013 \frac{\partial^2 c_b}{\partial x_b^2} + 0,000013 \frac{\partial^2 c_b}{\partial y_b^2} + 0,52 \frac{\partial^2 c_b}{\partial z_b^2} + 0,25 \sum_{j=1}^{I_r} Z_{jb}. \end{aligned}$$

Jak widać z powyższego, w pierwszym rzędzie odrzucić możemy w równaniu ogólnym człony opisujące dyfuzję burzliwą w kierunkach poziomych (x oraz y). Natomiast najbardziej uproszczona wersja tego równania obejmuje jedynie człon niestacjonarny, adwekcję pionową oraz przemiany źródłowe, czyli ma postać

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + u_z \frac{\partial c_i}{\partial z} = Z_i.$$

Możliwe są też oczywiście wszystkie wersje pośrednie. \square

5.3. Bezwymiarowa postać równania przewodzenia ciepła

Rozważać będziemy relację (4.220). Ze względu na formalne podobieństwo tej zależności i równania dyfuzji (4.215), możemy zaakceptować wyżej wprowadzone skale czasu, zmiennych przestrzennych i prędkości. Zamiast skali stężenia (5.5) przyjmujemy tu *skalę temperatury* T_s , zgodnie z równaniem

$$T = T_s T_b, \quad (5.24)$$

oraz *skalę intensywności wewnętrznych źródeł energii* q_{ess} , pisząc, że

$$q_{es} = q_{ess} q_{esb}. \quad (5.25)$$

Podstawiając teraz iloczyny skal i zmiennych bezwymiarowych do (4.220), otrzymamy relację analogiczną do (5.7), a mianowicie

$$\begin{aligned} \left(\frac{T_s}{t_s}\right) \frac{\partial T_b}{\partial t_b} + \left(\frac{u_{xs} T_s}{x_s}\right) u_{xb} \frac{\partial T_b}{\partial x_b} + \left(\frac{u_{ys} T_s}{y_s}\right) u_{yb} \frac{\partial T_b}{\partial y_b} + \left(\frac{u_{zs} T_s}{z_s}\right) u_{zb} \frac{\partial T_b}{\partial z_b} = \\ = \left(\frac{D_w T_s}{x_s^2}\right) \frac{\partial^2 T_b}{\partial x_b^2} + \left(\frac{D_w T_s}{y_s^2}\right) \frac{\partial^2 T_b}{\partial y_b^2} + \left(\frac{D_w T_s}{z_s^2}\right) \frac{\partial^2 T_b}{\partial z_b^2} + q_{ess} \cdot q_{esb}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Dzieląc je obustronnie przez wymiarowy mnożnik, stojący przed pierwszym członem adwekcyjnym, możemy napisać, że

$$\begin{aligned} Sh \frac{\partial T_b}{\partial t_b} + u_{xb} \frac{\partial T_b}{\partial x_b} + \frac{\alpha_{xy}}{\alpha_{uxy}} u_{yb} \frac{\partial T_b}{\partial y_b} + \frac{\alpha_{xz}}{\alpha_{uxz}} u_{zb} \frac{\partial T_b}{\partial z_b} = \\ = \frac{1}{PrRe_x} \frac{\partial^2 T_b}{\partial x_b^2} + \frac{1}{PrRe_y} \frac{\partial^2 T_b}{\partial y_b^2} + \frac{1}{PrRe_z} \frac{\partial^2 T_b}{\partial z_b^2} + \alpha_e q_{esb}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Wprowadzono w tej relacji bezwymiarowe liczby kryterialne, zdefiniowane już w poprzednim podrozdziale, a ponadto użyto znanego już symbolu liczby Prandtila (4.180)

$$Pr = \frac{v}{D_w} = \frac{\rho v C_w}{\lambda}. \quad (5.28)$$

Przyjęto też bezwymiarową liczbę λ_e , pozwalającą porównać intensywność źródeł energii z jej strumieniem adwekcyjnym, zgodnie z relacją

$$\alpha_e = \frac{q_{ess} x_s}{u_{xs} T_s}. \quad (5.29)$$

Również w tym przypadku możemy spodziewać się spełnienia warunków (5.22), które pozwalają uprościć (5.27) do następującej postaci:

$$Sh \frac{\partial T_b}{\partial t_b} + (\mathbf{u}_b \nabla_b) T_b = \frac{1}{PrRe} \Delta_b T_b + \alpha_e q_{esb}. \quad (5.30)$$

Niekiedy w literaturze spotkać można nieco inne wersje omówionych wyżej równań bezwymiarowych, w których iloczyn ($Pr Re$) lub ($Sc_i Re$) przed członem drugiego rzędu zastępowany jest liczbą Pecleta (4.227).

6. BURZLIWY TRANSPORT MASY I ENERGII

6.1. Przepływ burzliwy

6.1.1. Charakterystyka zjawiska

Po przekroczeniu pewnej wartości *liczby Reynoldsa* Re , stanowiącej iloczyn charakterystycznej prędkości u i charakterystycznego wymiaru liniowego L , dzielony przez kinematyczny współczynnik lepkości molekularnej

$$Re = \frac{uL}{\nu}, \quad (6.1)$$

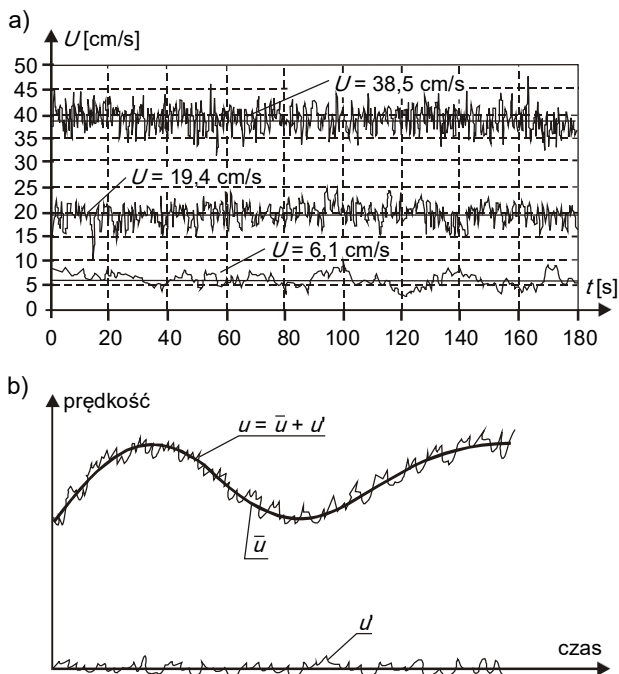
w masie płynącej cieczy pojawiają się bardzo specyficzne zjawiska. Wszystkie bazowe zmienne fizyczne (prędkość u i ciśnienie p dla cieczy jednorodnej o stałej gęstości i w stałej temperaturze, a ponadto gęstość ρ , temperatura T oraz/lub stężenie c_i każdej z substancji rozpuszczonych w przypadkach bardziej złożonych) zaczynają mianowicie wykazywać nieregularne *fluktuacje*, o niewielkim module (od kilku do kilkunastu procent wartości zmiennej), ale o znacznej częstotliwości (rys. 6.1). Mówimy, że *ruch laminarny (uwarstwiony)* przechodzi w *ruch turbulentny (burzliwy)* .

Przejście to zaczyna się w momencie osiągnięcia przez liczbę Reynoldsa *wartości krytycznej* Re_c . Nie zachodzi ono natychmiastowo, lecz odbywa się naprzemiennie (zjawisko *intermittencji* [33]) – przebiegi wykazujące fluktuacje przerywane są odcinkami regularnymi, laminarnymi, przy czym wzajemna proporcja między czasami trwania tych dwóch kategorii przebiegów przesuwana się ku warunkom ruchu burzliwego.

Krytyczna liczba Reynoldsa nie jest określona jednoznacznie. Zasadnicze znaczenie ma jej *dolna wartość krytyczna* Re_{cd} , poniżej której zawsze panuje ruch laminarny (nawet sztucznie wprowadzone zakłócenie warunków ruchu ulega wytłumieniu). Zależy ona od konkretnej sytuacji. Dla klasycznego przypadku przepływu w rurze kołowej mamy $Re_{cd} = 2300$. Jednak w korzystnych warunkach (gładkie ścianki kanałów, ich opływowe kształty, brak zaburzeń zewnętrznych) ruch laminarny udaje się utrzymać dla większych wartości liczby Reynoldsa, aż do jej *górnjej wartości krytycznej* Re_{cg} , gdy w końcu następuje przejście laminarno-turbulentne. Typowe przebiegi rzeczywistych rozkładów jednej ze składowych wektora prędkości w ruchu burzliwym pokazano na rys. 6.1a.

Przy omawianiu turbulencji (jak zresztą w przypadku każdego zjawiska w naturze i technice) pojawiają się dwa zasadnicze pytania:

- 1) jaka jest przyczyna tego zjawiska?
- 2) w jaki sposób można je opisać ilościowo?



Rys. 6.1. Rzeczywiste i uśrednione rozkłady prędkości w ruchu turbulentnym [109]

Pełnej odpowiedzi na pierwsze z nich dotychczas nie znamy. Choć problemowi temu poświęcona jest bardzo obszerna literatura (np. [24, 64, 68, 101, 163]), pozwalająca na bardzo nieraz szczegółowy opis różnych aspektów ruchu turbulentnego, to w istocie rzeczy nie potrafimy w pełni zidentyfikować i jednoznacznie opisać mechanizmu generacji chaotycznych fluktuacji zmiennych.

W skrócie można powiedzieć, że powstawanie turbulencji jest konsekwencją *utraty stabilności* przepływu (następującej wtedy, gdy siły bezwładności przeważają nad siłami lepkości), zaś fluktuacje zmiennych są formą *drgań samowzbudnych* (generowanych przez poruszający się płyn).

Lepiej wygląda kwestia odpowiedzi na drugie z powyższych pytań. Ilościowy opis rozwiniętego ruchu burzliwego sprowadza się do wyznaczania *średnich (głównych)* wartości poszczególnych zmiennych. W najbardziej typowym przypadku średnią taką definiujemy następująco:

$$\bar{\varphi} = \frac{1}{t_u} \int_t^{t+t_u} \varphi dt. \quad (6.2)$$

Symbolem φ oznaczono tu dowolną funkcję skalarną, ulegającą fluktuacjom. Przy rozważaniu specjalistycznych problemów, związanych z ruchem burzliwym, stosuje się także bardziej złożone sposoby wyznaczania średnich (np. uśrednianie wagowe, filtracja zaburzeń [24, 68]).

Tak więc każdą z rzeczywistych zmiennych φ możemy przedstawić jako sumę jej wartości średniej $\bar{\varphi}$ oraz fluktuacji φ'

$$\varphi = \bar{\varphi} + \varphi', \text{ gdzie } \bar{\varphi}' = 0. \quad (6.3)$$

Występujący w (6.2) czas *uśredniania* (lub *okres uśredniania*) t_u ma istotny wpływ na wartość średniej. Nie może on być ani zbyt krótki (gdyż wtedy nie zdołamy oddzielić od wartości głównej wszystkich składowych fluktuacji), ani zbyt długi (bo wtedy nadmiernie wyrównamy wartość główną, czyli jej część zaliczymy do składowych fluktuacyjnych). Dobór tego czasu musi być dokonywany bardzo starannie, ale problem ten dotyczy tylko takich sytuacji, gdy dysponujemy rzeczywistymi wartościami funkcji, którą musimy „wygładzić”. Są to sytuacje niezbyt powszechne, gdyż w praktyce technicznej wartości główne wyznaczamy z reguły nie drogą uśredniania rozkładów rzeczywistych, lecz poprzez rozwiązywanie odpowiednio przekształconych równań, opisujących rozważane zjawisko.

6.1.2. Równania Reynoldsa

Sposób otrzymania równań, opisujących uśrednioną prędkość \mathbf{u} i uśrednione ciśnienie p , jest szeroko omawiany w podręcznikach mechaniki płynów (np. [24, 64, 101, 163]). Z tego względu ograniczymy się tylko do stwierdzenia, że:

- 1) pierwszym krokiem jest podstawienie relacji (6.3) dla każdej ze zmiennych do ogólnych równań zachowania masy i pędu płynu;
- 2) następnie wykonujemy wszystkie możliwe operacje matematyczne, związane głównie z różniczkowaniem iloczynów oraz sum funkcji;
- 3) uśredniamy obie strony rozważanych równań, całkując je zgodnie z zależnością (6.2);
- 4) korzystając z faktu, że średnia wartość składowej fluktuacyjnej jest równa zero (patrz (6.3)), odrzucamy odpowiednie człony w rozważanych równaniach, otrzymując ostatecznie układ *równań Reynoldsa*, składający się z:

— równania zachowania masy dla ruchu turbulentnego

$$\operatorname{div} \bar{\mathbf{u}} = 0, \quad (6.4)$$

— równania zachowania pędu dla ruchu turbulentnego

$$\rho \frac{D\bar{\mathbf{u}}}{Dt} = \rho \mathbf{f} - \operatorname{grad} \bar{p} + \mu \Delta \bar{\mathbf{u}} + \operatorname{div}[\Pi]. \quad (6.5)$$

Tensor naprężeń burzliwych $[\Pi]$ (lub *tensor Reynoldsa*) zdefiniowany jest jako średnia w czasie wartość iloczynu diadycznego wektora fluktuacji prędkości przez siebie, pomnożona przez gęstość płynu, czyli

$$[\Pi] = - \overline{\rho \mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}'}, \quad \Pi_{ij} = - \overline{\rho u'_i u'_j}. \quad (6.6)$$

Zgodnie z klasyczną koncepcją L. Prandtla [100], wielkość $[\Pi]$ jest interpretowana jako miara dodatkowego stanu naprężenia, jaki pole fluktuacji prędkości wywołuje w płynie, przy czym dotyczy ono tylko ruchu średniego. Innymi słowy, możliwe jest odrzucenie turbulentnych fluktuacji prędkości przepływu, jeżeli zastąpimy je równoważnym dynamicznie, w sensie relacji (6.6), polem *naprężeń turbulentnych* $[\Pi]$.

Nasuwa się tu wyraźna analogia między „chaosem molekularnym”, działającym na przepływ rzeczywisty poprzez naprężenia molekularne, opisane tensorem naprężenia $[P]$

(patrz relacje (4.43) i (4.47)), a „chaosem turbulentnym”, który wpływa na przepływ główny poprzez tensor $[\Pi]$. Będziemy tę analogię wykorzystywali w dalszym ciągu naszych rozważań.

Podkreślmy tu jeszcze, że równania Reynoldsa w postaci (6.4) i (6.5) odnoszą się do cieczy o stałej gęstości. Jest to konsekwencją założenia (4.181), powszechnie przyjmowanego przy rozważaniu problemów migracji zanieczyszczeń (patrz podrozdz. 4.8).

Gdybyśmy nie mogli zaakceptować takiej sytuacji (czyli gdyby gęstość płynu zmieniała się w istotnym stopniu), wtedy należałoby jako punkt wyjścia przyjmując równania (4.175) i (4.176). W rezultacie obok tensora $[\Pi]$ otrzymalibyśmy jeszcze kilka członów, powstałych z mnożenia przez siebie wielkości fluktuacyjnych. Teoria turbulencji staje się wtedy nieporównanie bardziej złożona i mniej przydatna od wersji, prezentowanej w tej pracy.

6.1.3. Modele turbulencji

Współrzędne tensora $[\Pi]$ zdefiniowane są poprzez nieznanne składowe wektora fluktuacji prędkości, a więc są z definicji niewiadomymi. Wobec symetrii iloczynu diadycznego (6.6), liczba tych niewiadomych wynosi sześć.

Tak więc opisany wyżej sposób przekształcenia równań zachowania masy i pędu dla ruchu rzeczywistego prowadzi do takiej ich postaci, w której niewiadomymi są nie tylko uśrednione składowe prędkości \bar{u} i ciśnienie \bar{p} , lecz także sześć składowych tensora $[\Pi]$. Aby przywrócić tym równaniom walor użyteczności, należy je uzupełnić sześcioma skalarными relacjami, wiążącymi nieznanne współrzędne Π_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$ albo x, y, z) z pozostałymi zmiennymi. Zestaw takich sześciu funkcji nosi nazwę *modelu turbulencji*. Można wyróżnić trzy kategorie takich modeli:

- 1) *modele dyfuzyjne* (bazujące na podobieństwie pomiędzy „chaosem molekularnym” a „chaosem turbulentnym” [64]);
- 2) *modele różniczkowe* (zgodnie z którymi współrzędne tensora $[\Pi]$ opisywane są układami równań różniczkowych [64]);
- 3) *modele adwekcyjne* (których podstawą jest stwierdzenie, że skoro tensor $[\Pi]$ powstaje w wyniku przekształcenia członu adwekcyjnego, to jego współrzędne również należy opisywać w podobny sposób [124]).

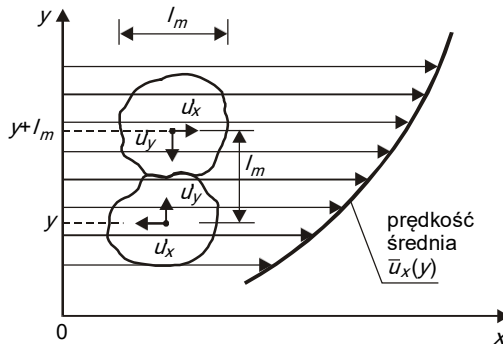
Praktyczne znaczenie mają tylko modele należące do pierwszej z tych kategorii. Wiążą się one z pojęciem *lepkości burzliwej* (lub *lepkości turbulentnej*).

Obok już wspomnianej analogii pomiędzy przenoszeniem pędu wśród molekuł (w skali „mikro”) a jego przenoszeniem przez turbulentne fluktuacje prędkości, których wpływ obrazowany jest przez tak zwane *autonomiczne obszary wirowe* (w skali „mezo”), ważnym elementem dyfuzyjnej koncepcji modelowania turbulencji jest stwierdzenie, że skala fluktuacji każdej z wielkości fizycznych jest rzędu zmiany uśrednionego rozkładu tej wielkości. Dla fluktuacji prędkości, rozważając dla czytelności jednokierunkowy przepływ średni w układzie płaskim $x0y$ (rys. 6.2), możemy więc przyjąć, że

$$|u'_x| \approx |u'_y| \approx l_m \left| \frac{\partial \bar{u}_x}{\partial y} \right|. \quad (6.7)$$

Formalnie oznacza to utożsamienie modułu fluktuacji prędkości rzeczywistej z przyrostem jej wartości średniej, wyrażonym przez pierwszy człon szeregu Taylora. Natomiast fizycznie jest to konsekwencją wizualizacji turbulentnych zaburzeń prędkości jako „*kaskady*

autonomicznych obszarów wirowych”. Tworzą one chaotyczną strukturę o silnej dynamice. Przepływ średni generuje wiry maksymalne dla danego przypadku, o pewnej przeciętnej średnicy l_m . Są one tworamii niestabilnymi, toteż rozpadają się na coraz mniejsze wiry, tworzące taką kaskadę. Skala najmniejszych wirów (które jednocześnie wchodzą w skład nadrzędnych wirów o większych skalach) jest na tyle mała (patrz (6.76)), że ich wewnętrzna struktura wyklucza niestabilność i dominują w niej siły lepkości. W ten sposób energia mechaniczna przepływu głównego przekazywana jest poprzez kolejne „poziomy chaosu” aż do poziomu minimalnego, na którym zachodzi jej molekularna dyssypacja (czyli zamiana w energię cieplną).



Rys. 6.2. Koncepcja drogi mieszania Prandtla

Dodajmy jeszcze, że na obecnym etapie rozwoju teorii turbulencji ta klasyczna koncepcja w pełni chaotycznej „kaskady wirowości” ulega istotnym modyfikacjom. Dużo uwagi poświęca się mianowicie większym obszarom wirowym, zauważając ich odrębność oraz wyraźny stopień uporządkowania. Nadano im nazwę *struktur koherentnych* [68].

Wracając do relacji (6.7) podkreślmy, że pozwala ona na wprowadzenie do definicji (6.6) tensora [II] pochodnych prędkości głównej, co umożliwi sformalizowanie wspomnianej już analogii między turbulencją i chaotycznym ruchem molekuł (hipoteza Newtona (4.122) wiąże naprężenia właśnie z przestrzennymi pochodnymi prędkości). Jednakże warunkiem ilościowego wykorzystania tej koncepcji jest bliższe określenie funkcji l_m . Według oryginalnej koncepcji (np. [100]) jest to charakterystyczny wymiar liniowy turbulentnych obszarów wirowych (rys. 6.2), ale jest też ta funkcja interpretowana jako średni dystans, który przebywa taki obszar wirowy jako całość, zanim ulegnie rozpadowi na mniejsze wiry, wskutek niestabilności. Z tego względu l_m określa się powszechnie mianem *drogi mieszania*. Jest to, jak widać, pojęcie o dużym ładunku spekulatywności. Sposób określenia l_m jest jednym z głównych wyróżników poszczególnych modeli turbulencji.

Przedstawiona wyżej podstawowa idea *dyfuzyjnej koncepcji burzliwości* jest bardzo obrazowa, toteż wywarła ogromny wpływ na rozwój metod modelowania uśrednionych pól przepływu. Jednak jedną z konsekwencji uzyskanej czytelności rozumowania jest jego odniesienie do uproszczonych warunków geometrycznych i kinematycznych (jak np. na dwuwymiarowym rys. 6.2). Tymczasem rzeczywiste przepływy turbulენტne są trójwymiarowe, co ze względu na tensorowy charakter wielkości [II] komplikuje matematyczny opis zjawiska.

Ponadto, jak to często bywa w naukach ścisłych i w technice, również tutaj koncepcje fizykalne wyprzedziły rozwój metod formalnych. Konkretnie mówiąc, dyfuzyjna koncepcja

burzliwości została sformułowana przez J. Boussinesqa w roku 1877, podczas gdy podstawy niezbędnego do jej pełnego opisu rachunku tensorowego opublikowane zostały przez G. Ricciego-Curbastro i T. Leviiego-Civitta w roku 1901.

Ten spekulatywny charakter genezy teorii turbulencji w dużym stopniu do dzisiaj cechuje jej badania, dydaktykę i aplikacje.

W ujęciu ogólnym omawiana tu koncepcja prezentowana jest w formie fenomenologicznego równania konstytutywnego, które przez analogię do hipotezy Newtona (4.113) nazwano hipotezą Boussinesqa-Prandtla. Mówi ono, że

Tensor naprężeń turbulentnych $[\Pi]$ jest liniową i niejednorodną funkcją tensora uśrednionej prędkości deformacji $[\bar{D}]$,

co można zapisać następująco:

$$[\Pi] = a [E] + [\mu_T] [\bar{D}]. \quad (6.8)$$

W przeciwieństwie do (4.113), tym razem nie mamy podstaw, aby *a priori* przyjąć izotropię burzliwej wymiany pędu, skutkiem czego mnożnik $[\mu_T]$, zwany dynamicznym współczynnikiem lepkości burzliwej (lub turbulentnej) jest tensorem. Ze względu na wymogi formalne [170], musi to być tensor czwartego rzędu. W zapisie wskaźnikowym ostatnia zależność ma więc postać

$$\Pi_{ij} = a E_{ij} + \mu_{Tijlm} \bar{D}_{lm}. \quad (6.9)$$

Korzystając z warunku równości śladów równań tensorowych (4.116), możemy skalar-ny współczynnik a wyrazić przez kinetyczną energię turbulencji (odniesioną do jednostki masy płynu)

$$k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \bar{u}_i' \bar{u}_i' = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^3 \Pi_{ii}, \quad (6.10)$$

co daje

$$\Pi_{ij} = - \left\{ \frac{2}{3} \rho k + \frac{1}{3} t_r([\mu_T][\bar{D}]) \right\} E_{ij} + \mu_{Tijlm} \bar{D}_{lm}. \quad (6.11)$$

Tensor $[\mu_T]$ ma w kartezjańskim układzie 81 współrzędnych, przy czym dzięki symetrii tensorów $[\mu]$ i $[\bar{D}]$ tylko 36 z nich jest niezależnych. Uwzględniając funkcję k , mamy więc do wyznaczenia 37 niewiadomych funkcji, domykających taki model turbulencji. Jest to bardzo poważne utrudnienie. Ponadto należy wziąć pod uwagę pewne istotne wady strukturalne omawianej tu koncepcji [119], jak też eksperymentalnie wyznaczane charakterystyki turbulencji (np. [24, 163]). Wszystko to powoduje, że w praktyce proces turbulentnego przenoszenia pędu traktuje się jako izotropowy, pisząc zamiast (6.9), że

$$\Pi_{ij} = - \frac{2}{3} \rho k E_{ij} + 2 \mu_T \bar{D}_{ij} I_{ij} = k E_{ij} + 2 D_{ij}. \quad (6.12)$$

Podstawiając ostatnie równanie konstytutywne do (6.5), otrzymujemy roboczą wersję równania zachowania pędu dla przepływu burzliwego. Rozwiązania tego równania uzależnione są od sposobu opisu (już teraz skalarnego) dynamicznego współczynnika lepkości burzliwej μ_T , stosowanego zamiennie z kinematycznym współczynnikiem lepkości burzliwej

$$\nu_T = \mu_T / \rho. \quad (6.13)$$

6.1.4. Współczynnik lepkości turbulentnej

6.1.4.1. Uwagi ogólne. Istniejące metody wyznaczania wartości μ_T omówimy stosunkowo dokładnie, gdyż mają one ścisły związek z opisem interesującej nas tu migracji zanieczyszczeń w warunkach ruchu burzliwego.

W pierwszej kolejności zauważmy, że jeżeli w relacji (6.6) wykorzystamy zależność (6.7), to struktura współczynnika ν_T jest wobec (6.12) określona przez następującą relację:

$$\nu_T \approx I_m |u'|. \quad (6.14)$$

Jest ona kolejnym wyrazem „analogii molekularno-turbulentnej”, bo podobnie jak poprzednio (patrz zależność (4.129)) stwierdzamy, że współczynnik lepkości określa iloczyn charakterystycznego wymiaru liniowego oraz charakterystycznej prędkości (I_m oraz $|u'|$).

Oznacza to, że μ_T zależy od warunków ruchu oraz zmienia się w przestrzeni i w czasie. Jest to istotna różnica w stosunku do współczynnika molekularnej wymiany pędu μ , który opisuje własności substancji, a często jest traktowany jako stała materiałowa.

Zmienność lepkości burzliwej utrudnia rozwiązywanie równań ruchu. Z tego względu pojawia się pokusa, aby (przynajmniej w pierwszym przybliżeniu) potraktować ten współczynnik jako stały (np. [71]). Jednakże założenie takie można brać pod uwagę tylko wyjątkowo i akceptować je po uzyskaniu odpowiednio wysokiego stopnia przekonania co do jego dopuszczalności. Jak bowiem widać z (6.5) oraz (6.12), gdyby przyjąć, że $\mu_T = \text{const}$, wtedy równania Reynoldsa staną się formalnie identyczne z równaniami Naviera-Stokesa. Jedyna różnica polegałaby na zmianie liczbowej wartości współczynnika lepkości. W rezultacie przepływ turbulentny cieczy w rurze kołowej byłby opisany parabolicznym profilem prędkości, tak jak to ma miejsce w ruchu laminarnym, a nie miałyby doświadczalnie potwierdzonego profilu typu logarytmicznego [101, 134].

Poniżej przedstawimy przegląd metod wyznaczania kinematycznego współczynnika lepkości burzliwej μ_T . Nie będzie on kompletny, gdyż w literaturze zagadnienia znaleźć można bardzo znaczną liczbę takich modeli, często o bardzo wąskim zakresie stosowności. Ograniczymy się więc do przedstawienia podstawowych propozycji oraz tych koncepcji szczegółowych, które zyskały szeroką aprobatę.

Ze względu na liczbę równań różniczkowych, niezbędnych do określenia wartości, będziemy mówili o trzech kategoriach takich modeli:

- 1) *modele „zerorównaniowe”* (gdy takie równania są zbędne);
- 2) *modele „jednorównaniowe”* (gdy potrzeba jednego takiego równania);
- 3) *modele „dwurównaniowe”* (wymagające dwóch równań różniczkowych).

6.1.4.2. „Zerorównaniowe” modele turbulencji. Po wprowadzeniu relacji (6.7) do (6.6), celem wyeliminowania jednej ze składowych prędkości pulsacyjnej, możemy w identyczny sposób wyrazić drugą z nich, co prowadzi do *modelu turbulencji według Prandtla* [100], zgodnie z którym dla prostego przepływu jednokierunkowego (rys. 6.2) mamy

$$\nu_T = I_m^2 \left| \frac{\partial \bar{u}_x}{\partial y} \right|. \quad (6.15)$$

Istotnym mankamentem tej relacji jest zerowanie się ν_T w obszarze o zerowym gradiencie prędkości, co jest sprzeczne z obserwacją [64]. Dla przepływu przestrzennego ostatnią zależność uogólnia się następująco [146]:

$$\nu_T = I_m^2 [2 \text{tr}([\bar{D}][\bar{D}])]^{1/2}, \quad (6.16)$$

gdzie iloczyn tensora $[\bar{D}]$ przez siebie ma w zapisie wskaźnikowym postać

$$([\bar{D}][\bar{D}])_{ij} = \sum_{k=1}^3 D_{ik} D_{kj} \quad (6.17)$$

Podstawową przesłanką do wyznaczenia drogi mieszania l_m jest stwierdzenie, że turbulencja zanika na ściance sztywnej (mówimy o laminaryzujących własnościach ścianki), zaś rośnie z oddaleniem od tej ścianki. Chociaż wzrost ten jest dość złożony, to w pierwszym przybliżeniu można przyjąć, że ma on charakter *liniowy*. Prowadzi to do bodajże najbardziej popularnej relacji, zgodnie z którą

$$l_m = \kappa y_s = 0,417 y_s \quad (6.18)$$

$\kappa = 0,417$, lub niekiedy $\kappa = 0,4$ – empiryczna stała von Karmana, y_s – odległość od ścianki.

Zależność ta jest w istocie rzeczy zlinearyzowaną relacją

$$l_m/R = 0,14 - 0,08 \left(1 - \frac{y}{R}\right)^2 - 0,06 \left(1 - \frac{y}{R}\right)^4 \quad (6.19)$$

zaproponowaną przez Prandtla dla przewodów kołowych o promieniu R .

Wyrażenie (6.18) dość dobrze opisuje skalę turbulencji w przepływach o rozwiniętej warstwie przyściennej (koryta otwarte, rzeki, kanały, rurociągi itp.). Według Escudiera [64] celowe jest jej skorygowanie, polegające na przyjęciu stałej wartości l_m w odległości od ścianki przekraczającej około 20% grubości warstwy przyściennej δ_p , zgodnie z relacjami:

$$\left. \begin{aligned} l_m &= \kappa y_s & \text{dla } y_s/\delta_p \leq \lambda/\kappa \\ l_m &= \lambda \delta_p & \text{dla } y_s/\delta_p > \lambda/\kappa \end{aligned} \right\} \quad (6.20)$$

Empiryczne współczynniki λ oraz κ , wyznaczone przez różnych autorów, wahają się w granicach od $\lambda = 0,09$ i $\kappa = 0,435$ do $\lambda = 0,075$ i $\kappa = 0,6$.

Bardziej rozbudowaną zależność podał van Driest [166], proponując

$$l_m = \kappa y_s \left[1 - \exp\left(-\frac{y_s \sqrt{\tau_s \rho}}{A \mu}\right) \right] \quad (6.21)$$

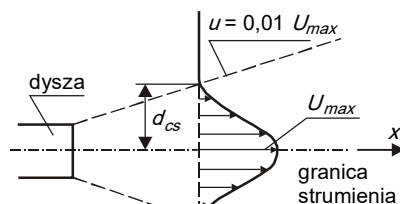
gdzie: τ_s – naprężenie styczne na ściance, μ – dynamiczny współczynnik lepkości molekularnej płynu, $A = 26,0$ – stała empiryczna.

W przypadku turbulencji swobodnej (gdy ciecz lub gaz przepływają w oddaleniu od ścianki) przyjmuje się relacje typu

$$l_m = C d_{cs} \quad (6.22)$$

gdzie d_{cs} określa charakterystyczny wymiar liniowy przepływu. Sytuacje takie będą nas szczególnie interesowały wtedy, gdy ciecz zanieczyszczona zostaje wprowadzona do odbiornika z pewną prędkością, tworząc strumień zatopiony (rys. 6.3). Wielkość d_{cs} jest wówczas z reguły definiowana jako odległość od osi strumienia do punktu, w którym prędkość spada do 1% prędkości maksymalnej. Dla strumienia płaskiego w relacji (6.22) można przyjąć $C = 0,09$, zaś dla strumienia kołowego – $C = 0,075$.

Omówiony wyżej model turbulencji, bazujący na koncepcji Boussinesqa i Prandtla, ma istotną



wadę: prowadzi do nieliniowego równania konstytutywnego dla naprężeń Reynoldsa (6.12). Jest to na tyle poważny problem, że badacze zagadnienia dużo uwagi poświęcili próbom prostszego wyznaczania charakterystycznej prędkości pulsacji w (6.14). Nasuwa się tu dość oczywiste pytanie o możliwość wyrażenia tej wielkości przez prędkość ruchu głównego. Co prawda związek między \mathbf{u}' a \mathbf{u} nie jest opisany prostą zależnością, ale da się on zidentyfikować, co prowadzi do następującego wzoru, określającego kinematyczny współczynnik lepkości burzliwej [113]:

$$\nu_T = 0,282 \lambda L V (\overline{|\mathbf{u}'|} / V)^6, \quad (6.23)$$

gdzie: λ – współczynnik strat według Nikuradsego, L – skala liniowa rozważanego układu (np. głębokość warstwy cieczy), V – skala prędkości przepływu.

6.1.4.3. „Jednorównaniowe” modele turbulencji. W par. 6.1.3 zdefiniowaliśmy kinetyczną energię turbulencji k (6.10). Jest ona odniesiona do jednostki masy, czyli ma wymiar drugiej potęgi prędkości. Pierwiastek drugiego stopnia z tej wielkości jest średniokwadratową wartością prędkości pulsacji, a więc stanowi naturalną miarę $|u'|$ w relacji (6.14). Wykorzystując tę możliwość, otrzymujemy formułę Prandtla-Kolmogorowa

$$\nu_T = C l_m \sqrt{k} \quad (6.24)$$

(z reguły przyjmuje się $C = 1$). Liniową skalę turbulencji (*drogę mieszania*) l_m zadaje się w tym modelu, jak i poprzednio, wyrażeniami algebraicznymi (patrz pkt 6.1.4.2), natomiast k wyznacza się z osobnego równania różniczkowego.

Jego ogólna postać wyprowadzana jest z omówionych już równań ruchu cieczy. Interesującym i kluczowym elementem tych przekształceń (omawianych w literaturze specjalistycznej, np. [33, 124]) jest wyznaczenie pochodnej substancjalnej fluktuacji prędkości (patrz (6.2))

$$\frac{D\mathbf{u}'}{Dt} = \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \frac{D\overline{\mathbf{u}}}{Dt}, \quad (6.25)$$

drogą odejmowania od siebie prawych stron równania Naviera-Stokesa (4.192) oraz równania Reynoldsa (6.5). W otrzymanym wyrażeniu występuje szereg skomplikowanych kombinacji zmiennych, które należy wyrazić w postaci umożliwiającej ich praktyczne wykorzystanie. Można to zrobić na różne sposoby, co prowadzi do różnych szczegółowych wersji rozważanej zależności. Za wersję szczególnie często stosowaną należy uznać następujące równanie [101, 126]:

$$\frac{Dk}{Dt} = \text{div}[(\nu + \nu_T) \text{grad } k] + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \Pi_{ij} \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} - 0,08 \frac{k^{3/2}}{l_m}. \quad (6.26)$$

Składowe tensora Reynoldsa Π_{ij} opisane są równaniem konstytutywnym (6.12), czyli ostatnie równanie należy traktować jako kolejny element układu (6.4), (6.5), (6.12) i (6.24). Jak widać, stosowanie modeli „jednorównaniowych” jest zadaniem złożonym, szczególnie jeśli uwzględnimy konieczność sformułowania dla tych równań warunków granicznych.

6.1.4.4. „Dwurównaniowe” modele turbulencji. Kolejna kategoria wyrażań, pozwalających na wyznaczenie współczynnika μ_T , w mniejszym niż poprzednie stopniu bazuje na bezpośred-

niej analizie mechanizmu turbulentnej wymiany pędu, a w głównej mierze oparta jest na dyskusji proporcji między poszczególnymi wielkościami fizycznymi (teoria Kołmogorowa [33]). Relacje końcowe formułuje się tu z uwzględnieniem zasad *analizy wymiarowej* (twierdzenie Buckinghama [101]).

Istotne znaczenie przywiązuje się tu do *intensywności dysypacji energii ruchu fluktuacyjnego* ε . Jest ona definiowana jako podwójny iloczyn dynamicznego współczynnika lepkości molekularnej przez uśrednioną sumę kwadratów współrzędnych pulsacyjnej części tensora prędkości deformacji [101]

$$\varepsilon = 2\nu[\overline{D}]^2. \quad (6.27)$$

Zgodnie z (4.115) oraz (6.2), mamy tu

$$[D'] = [D] - [\overline{D}]. \quad (6.28)$$

Uwzględniając ponadto wpływ kinetycznej energii turbulencji k , otrzymuje się tak zwany *model „ $k - \varepsilon$ ”*, zgodnie z którym

$$v_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (6.29)$$

Funkcja k wyznaczana jest z relacji typu (6.26), zaś ε – z analogicznego równania różniczkowego. Najczęściej pisze się je następująco:

$$\frac{D\varepsilon}{Dt} = \text{div} \left[\left(v + \frac{v_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \text{grad } \varepsilon \right] = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \Pi_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k}. \quad (6.30)$$

Często przyjmowane wartości stałych empirycznych tego modelu wynoszą $C_\mu = 0,09$, $\sigma_\varepsilon = 1,03$, $C_{\varepsilon 1} = 1,44$, $C_{\varepsilon 2} = 1,92$. Stopień trudności formalnej tego modelu jest jeszcze wyższy niż w przypadku modeli „jednorównaniowych”, jednakże przykłady zastosowań dobrze świadczą o jego jakości.

6.2. Dyfuzja burzliwa

6.2.1. Przekształcenie równań transportu

Opis sposobu zachowania się masy i -tej substancji rozpuszczonej w płynie w warunkach ruchu burzliwego bazuje na tych samych koncepcjach, które już omówiliśmy dla przypadku płynu jednorodnego (podrozdział 6.1). Tak więc stężenie tej substancji rozkładamy na część główną \bar{c}_i (zgodnie z (6.1)) i pulsacyjną c_i' , pisząc

$$c_i = \bar{c}_i + c_i', \quad (6.31)$$

podobnie jak to uczyniliśmy z wektorem prędkości

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}'. \quad (6.32)$$

Rzeczywisty transport rozważanej substancji opisany jest równaniem zachowania masy, które przy wszystkich omówionych w rozdz. 4. założeniach (w tym $\mathbf{u}_b = \mathbf{u}$) pisać będziemy w postaci (4.190). Podstawiając do tego równania dwie ostatnie relacje, mamy

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + \frac{\partial c'_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{c}_i \bar{\mathbf{u}}) + \operatorname{div}(\bar{c}_i \mathbf{u}') + \operatorname{div}(c'_i \bar{\mathbf{u}}) + \operatorname{div}(c'_i \mathbf{u}') = \\ = D_{M_i} \Delta \bar{c}_i + D_{M_i} \Delta c'_i + \bar{Z}_i + Z'_i. \end{aligned} \quad (6.33)$$

Całkowanie obu stron tego równania względem czasu, zgodnie z (6.1), umożliwia nam jego uproszczenie, gdyż w wyniku tej operacji człony o charakterze fluktuacyjnym przyjmują wartość zero, jak to zapisano w ogólnej relacji (6.3). Przykładowo

$$\int_t^{t+t_u} \operatorname{div}(\bar{c}_i \mathbf{u}') dt = \operatorname{div}(\bar{c}_i \int_t^{t+t_u} \mathbf{u}' dt) = 0. \quad (6.34)$$

Po wykonaniu wszystkich tego typu przekształceń, pamiętając, że powtórne uśrednianie (6.1) z definicji nie zmienia wartości funkcji, czyli uwzględniając, że

$$\bar{\bar{\varphi}} = \bar{\varphi}, \quad (6.35)$$

otrzymujemy następujące *równanie burzliwej adwekcji-dyfuzji*:

$$\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{c}_i \bar{\mathbf{u}}) = D_{m_i} \Delta \bar{c}_i + \operatorname{div}(-\bar{m}_{T_i}) + \bar{Z}_i. \quad (6.36)$$

Symbolem m_{T_i} oznaczyliśmy tu *jednostkowy burzliwy strumień masy i -tej substancji rozpuszczonej*, który zgodnie z (6.33) jest zdefiniowany jako

$$m_{T_i} = \overline{c'_i \mathbf{u}'}. \quad (6.37)$$

Do użycia powyższego określenia upoważnia nas fizyczna interpretacja ostatniej relacji, którą ilustruje rys. 6.4. Składowe wektora chwilowej fluktuacji prędkości w punkcie P

$$\mathbf{u}' = [u'_x, u'_y, u'_z] \quad (6.38)$$

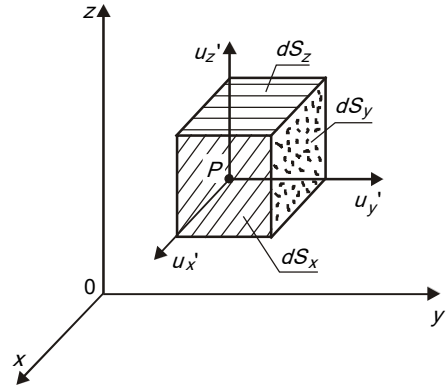
powodują lokalne przemieszczenie masy płynu przez elementarne powierzchnie dS_x , dS_y i dS_z , o elementarnym wydatku

$$d\mathbf{Q} = [dQ_x, dQ_y, dQ_z] = [u'_x dS_x, u'_y dS_y, u'_z dS_z]. \quad (6.39)$$

Mnożąc ten wydatek przez stężenie i -tej substancji w punkcie P c_{iP} , otrzymujemy elementarny strumień masy $d\mathbf{M}_P$, opuszczającej rejon tego punktu wskutek fluktuacji prędkości. Strumień ten można przedstawić jako sumę dwóch części. Jedna z nich jest związana ze stężeniem średnim, zaś druga – z fluktuacją stężenia:

$$d\mathbf{M}_P = c_{iP} d\mathbf{Q} = \bar{c}_{iP} d\mathbf{Q} + c'_{iP} d\mathbf{Q}. \quad (6.40)$$

Pierwszy z tych składników po uśrednieniu przyjmuje wartość zero, gdyż $d\mathbf{Q}$ ma charakter fluktuacji, ale drugi – pozostaje różny od zera. Odnosząc jego składowe do jednostek powierzchni odpowiednio dS_x , dS_y oraz dS_z widzimy, że (6.37) rzeczywiście opisuje średni w



Rys. 6.4. Interpretacja burzliwego strumienia masy

czasie jednostkowy strumień masy i -tej substancji rozpuszczonej, powodowany fluktuacją prędkości, a związany z fluktuacją stężenia. Omówione powyżej zjawisko nazywamy *dyfuzją turbulentną* (lub zamiennie *dyfuzją burzliwą*).

6.2.2. Prawo Ficka dla ruchu turbulentnego

Kontynuując analogię między chaotycznym ruchem autonomicznych obszarów wirowych a chaotycznym ruchem molekularnym, możemy fluktuację stężenia w (6.37) wyrazić przez relacje typu (6.7), co w prostym przypadku ruchu płaskiego (rys. 6.2), gdy $\bar{c} = \bar{c}(y)$, daje

$$m_{Ty} = \overline{u'_y J'_m} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} = -D_T \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y}. \quad (6.41)$$

Jest to relacja o strukturze identycznej z prawem Ficka (4.89), jeżeli mnożnik przed pochodną potraktujemy jako *współczynnik burzliwej dyfuzji* (lub *burzliwego transportu masy*), analogiczny co do sensu fizycznego ze współczynnikiem dyfuzji molekularnej według (4.92).

Jednakże opisowo przedstawiona analogia nie jest jedynym argumentem, przemawiającym za uogólnieniem prawa Ficka, obejmującym procesy transportu turbulentnego. Druga przesłanka ma charakter ilościowy.

Procesy te, jak już wiemy, powodują rozpraszanie masy i -tej substancji rozproszonej, a stopień rozproszenia może być opisany *wariancją stężenia* $\sigma^2(t)$ [20]. Dla osi $0x$ mamy

$$\sigma_x(t) = \frac{1}{M_i} \int_V (x - \tilde{x})^2 c_i(x, y, z, t) dV, \quad (6.42)$$

gdzie masa substancji rozproszonej w objętości V jest równa

$$M_i = \int_V c_i(x, y, z, t) dV. \quad (6.43)$$

Zmienna pomocnicza \tilde{x} określa współrzędną x środka ciężkości rozkładu stężenia i dana jest całką

$$\tilde{x} = \frac{1}{M_i} \int_V x c_i(x, y, z, t) dV. \quad (6.44)$$

Analogicznie wyznaczmy wielkości $\sigma_y^2(t)$ oraz $\sigma_z^2(t)$, odpowiednio dla kierunków $0y$ oraz $0z$.

Wykorzystując znane rozwiązania dla dyfuzji molekularnej (dla której prawo Ficka było wprowadzone w swej wersji oryginalnej), na przykład według relacji (4.344), można pokazać [20], że istnieje liniowa zależność wariancji stężenia od czasu

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 2D_s t. \quad (6.45)$$

Jest to bardzo ważna cecha procesu dyfuzji, opisywanej prawem Ficka. Zwany jest on także *dyfuzją gaussowską*, gdyż kształt wykresu funkcji (4.344) ma kształt krzywej Gaussa. Jeżeli w rozważanym zagadnieniu warunek (6.45) nie jest spełniony, mówimy o *dyfuzji niegaussowskiej*. Dla takiego procesu istnieją pewne wersje *nieliniowego prawa Ficka*, lecz nie mają one jeszcze praktycznego znaczenia [110].

W przypadku dyfuzji turbulentnej stwierdzono eksperymentalnie [160], że warunek (6.45) można uznać za spełniony nie od samego momentu wprowadzenia substancji rozproszonej do płynu, lecz dopiero po upływie pewnego czasu, równego *skali czasowej Lagrange'a* T_L , określonej relacją

$$T_L = \int_0^{\infty} R_L(\tau) d\tau, \quad (6.46)$$

gdzie R_L jest bezwymiarową *funkcją autokorelacyjną Lagrange'a*. Funkcja ta wyraża związek (korelację) pomiędzy fluktuacjami prędkości ze wzrostem czasu τ pomiędzy nimi, zapisywany następująco:

$$R_L(\tau) = \frac{u'(t=t_0)u'(t=t_0+\tau)}{u'^2(t=t_0)}. \quad (6.47)$$

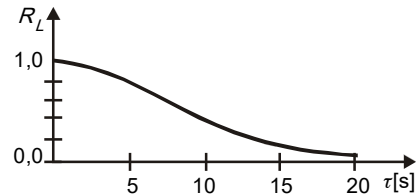
Typowy przebieg tej funkcji pokazano na rys. 6.5.

Z definicji dla $\tau = 0$ mamy $R_L = 1$ (pełna korelacja), podczas gdy $R_L \rightarrow 0$ dla $\tau \rightarrow \infty$ (brak jakiegokolwiek korelacji). Przebieg funkcji R_L można aproksymować relacją

$$R_L = \exp(-A\tau^2) \quad (6.48)$$

(przykładowo możemy przyjąć $A = 0,01 \text{ s}^{-2}$). Podstawiając ją do (6.46), mamy

$$T_L = \sqrt{\pi/4A} = 8,86 \text{ s}. \quad (6.49)$$



Rys. 6.5. Typowa funkcja autokorelacyjna Lagrange'a dla przepływu burzliwego [33]

Rezultat ten oznacza, że mieszanie turbulentne nabiera cech gaussowskich po upływie od kilku do kilkunastu sekund od chwili wprowadzenia substancji do płynu. W porównaniu ze skalami czasowymi migracji zanieczyszczeń w środowisku naturalnym (rzędu przynajmniej kilku godzin) lub nawet w obiektach technicznych (rzędu przynajmniej kilkunastu minut) jest to niewiele, toteż w większości rozważanych tu zagadnień możemy przyjąć następujące uogólnione *prawo Ficka dla dyfuzji burzliwej*:

Jednostkowy burzliwy strumień masy każdego z „i” składników roztworu (mieszanej molekularnej) jest liniową i jednorodną funkcją gradientu gęstości rozkładu masy (czyli stężenia) tego składnika.

W przeciwieństwie do wyjściowej wersji tego prawa, odnoszącej się do transportu względnego na poziomie molekularnym (pkt 4.4.2.1), nie możemy tu przyjąć, że proces dyfuzji burzliwej jest zawsze izotropowy, gdyż struktura turbulentnych fluktuacji wykazuje pewne ukierunkowanie. W ogólnym przypadku proces dyfuzji burzliwej jest więc *anizotropowy*, skutkiem czego *współczynnik dyfuzji burzliwej* $[D_T]$ jest wielkością tensorową. Prawo Ficka przyjmuje wtedy następującą postać:

$$m_{Ti} = - [D_T] \text{ grad } \bar{c}_i. \quad (6.50)$$

Gdy jednak możliwe jest założenie *izotropii*, co w przypadku turbulencji wyrażone jest warunkiem równości średniokwadratowych wartości poszczególnych składowych prędkości fluktuacyjnych

$$\overline{u_x^2} = \overline{u_y^2} = \overline{u_z^2}, \quad (6.51)$$

wtedy współczynnik D_T jest skalarem i mamy

$$\mathbf{m}_{Ti} = -D_T \text{grad } \bar{c}_i. \quad (6.52)$$

6.2.3. Współczynnik dyfuzji burzliwej

6.2.3.1. Zasada wyznaczania współczynnika. W pierwszej kolejności zauważmy, że wartość D_T określona jest przez uśredniony iloczyn miary prędkości pulsacyjnej oraz drogi mieszania, zgodnie z (6.41). Żadna z tych zmiennych nie zależy bezpośrednio od rodzaju dyfundującej substancji, w przeciwieństwie do sytuacji w ruchu molekularnym (gdy prędkość ruchu chaotycznego oraz średnia droga swobodna zależały od chemicznej budowy molekuł substancji rozpuszczonej). Oznacza to, że *współczynnik dyfuzji burzliwej jest uzależniony od pola prędkości*, a nie zależy od chemicznego składu roztworu. Formalnym wyrazem tego stwierdzenia jest brak indeksu i przy symbolu $[D_T]$ lub odpowiednio D_T dla przypadku izotropowego.

Co prawda w niektórych sytuacjach możemy spodziewać się wpływu substancji rozpuszczonej na ruch roztworu, lecz w pierwszej kolejności uwidoczniłby się on w wartości współczynnika lepkości molekularnej tego roztworu. Tymczasem w zagadnieniach migracji zanieczyszczeń interesują nas z reguły bardzo umiarkowane stężenia substancji rozpuszczonej, które w pomijalnie małym stopniu wpływają na lepkość płynu niejednorodnego.

Z porównania (6.14) i (6.41) widzimy, że na przyjętym tu poziomie dokładności modelu, opisującego procesy turbulentnego przenoszenia masy i pędu, wzory definiujące współczynniki wymiany mają dla każdego z tych procesów jednakową strukturę (a jak zobaczymy w par. 6.3.2, jest ona identyczna także dla procesu turbulentnego transportu energii cieplnej).

Trzeba jednak podkreślić, że niezależnie od identyczności mechanizmów tych procesów w ujęciu opisowym, musimy też brać pod uwagę formalne aspekty zagadnienia. Wiemy już, że w przypadku anizotropowym współczynnik lepkości burzliwej jest tensorem IV rzędu (6.9), zaś współczynnik burzliwej dyfuzji – tensorem II rzędu. Nie można więc generalnie mówić o ich identyczności, a jedynie o równoważności procesów, które one opisują. Identyczność taka istnieje tylko w przypadku izotropowym. Piszemy wtedy, że

$$D_T = \nu_T, \quad (6.53)$$

ale i ta zależność musi być traktowana ostrożnie, bowiem dokładne pomiary wykazują różnicę między tymi współczynnikami. Ich wzajemny iloraz, zwany *turbulentną liczbą Schmidta*

$$Sc_T = \frac{\nu_T}{D_T} \quad (6.54)$$

(patrz też (5.14)) jest różny od jedności. I choć w literaturze przedmiotu spotyka się relację (6.53), to częściej zaleca się przyjmować [64]

$$Sc_T = 0,85. \quad (6.55)$$

Oznacza to, że *do wyznaczenia skalarnej wartości D_T (gdy zakładamy izotropię procesu) można wykorzystać wszystkie modele turbulencji*, omówione już w par. 6.1.4. Tak też

często czyni się podczas rozwiązywania problemów burzliwej dyfuzji masy, ale w praktyce bierze się też pod uwagę dwa istotne czynniki, różnicujące transport pędu i masy. Chodzi mianowicie o to, że przy opisie tego pierwszego z reguły współczynnik lepkości burzliwej traktuje się jako izotropowy (czyli skalarny), ale zmienny w przestrzeni. Natomiast w opisie dyfuzji burzliwej stosunkowo często traktujemy D_T jako wartość stałą, lecz uwzględniamy jej anizotropię. Rozważmy bliżej ten istotny problem.

6.2.3.2. Anizotropia dyfuzji burzliwej. W ogólnym przypadku współczynnik $[D_T]$ w relacji (6.50) określony jest przez dziewięć skalarnych funkcji D_{Tmn} ($m, n = x, y, z$), wobec czego człon opisujący dyfuzję burzliwą w (6.36) przyjmuje następującą postać (którą dla czytelności zapiszemy w kartezjańskim układzie współrzędnych):

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(-\mathbf{m}_{Ti}) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{Txx} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} + D_{Txy} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} + D_{Tzx} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} \right) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{Tyx} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} + D_{Tyy} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} + D_{Tyz} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} \right) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{Tzx} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} + D_{Tzy} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} + D_{Tzz} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} \right). \end{aligned} \quad (6.56)$$

W teorii rachunku tensorowego wprowadza się pojęcie *kierunków głównych*. Wyznaczają one taki układ współrzędnych (*osie główne*), w którym reprezentacja tensora (w tym przypadku tensora $[D_T]$) ma postać diagonalną, czyli

$$[D_T] = \begin{bmatrix} D_{TL} & 0 & 0 \\ 0 & D_{TH} & 0 \\ 0 & 0 & D_{TV} \end{bmatrix}. \quad (6.57)$$

Relacja (6.56) przyjmuje wtedy następującą formę:

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(-\mathbf{m}_{Ti}) &= \frac{\partial}{\partial L} \left(D_{TL} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial L} \right) + \frac{\partial}{\partial H} \left(D_{TH} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial H} \right) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial V} \left(D_{TV} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial V} \right), \end{aligned} \quad (6.58)$$

która jest zdecydowanie bardziej prosta i wygodniejsza w stosowaniu niż (6.56). Podkreślmy jednak raz jeszcze, że jest to prawdziwy zapis wtedy, gdy osie L , H i V są zorientowane zgodnie z głównymi osiami zjawiska. Warunek ten musi być każdorazowo zbadany. Jak wykazują badania struktury procesu burzliwego transportu (które omówimy w następnym punkcie), w szczególnym przypadku przepływu jednokierunkowego, gdy $\mathbf{u} = [u_x]$, możemy przyjąć, że $L = x$, $H = y$, zaś $V = z$. Równanie (6.36) ma wtedy wobec (6.4) postać

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + u_x \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} &= D_{Mi} \left(\frac{\partial^2 \bar{c}_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{c}_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{c}_i}{\partial z^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{Tx} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} \right) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{Ty} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{Tz} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} \right) + \bar{Z}_i. \end{aligned} \quad (6.59)$$

Niestety, w publikacjach poświęconych prezentacji praktycznych zastosowań omawianych tu modeli można często spotkać równania o charakterze formalnie „pośrednim”, które nie spełniają omówionych wyżej warunków poprawnego zapisu matematycznego. Wektor prędkości jest tam zapisywany za pomocą trzech (w przestrzeni) lub dwóch (na płaszczyźnie) składowych, przy czym kierunki układu współrzędnych wybierane są dowolnie i nie pokrywają się z osiami głównymi, ale prawa strona takiego równania ma postać jak w zapisie (6.59). Innymi słowy, w (6.56) pomija się wtedy mieszane pochodne stężenia. W jeszcze innym ujęciu można powiedzieć, że traktuje się tam kierunki współrzędnych prędkości jako osie główne, co wobec dowolności wyboru układu odniesienia jest błędem. Ma to poważne konsekwencje, które wykazemy poniżej, na przykładzie zjawiska dwukierunkowego (w płaszczyźnie x_0y), gdy $\bar{Z}_i = 0$.

Równanie transportu w ujęciu dokładnym ma następującą postać:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + \bar{u}_x \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} + \bar{u}_y \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left[(D_{Mi} + D_{Txx}) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} + D_{Txy} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left[D_{Tyx} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} + (D_{Mi} + D_{Tyy}) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} \right]. \end{aligned} \quad (6.60)$$

Jeżeli przyjąć, że kierunkami głównymi są $L \parallel \bar{\mathbf{u}}$ oraz $H \perp L$, wtedy zamiast (6.60) mamy [55]

$$\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + \bar{u}_L \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial L} = \frac{\partial}{\partial L} \left[(D_{Mi} + D_{TL}) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial L} \right] + \frac{\partial}{\partial H} \left[(D_{Mi} + D_{TM}) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial H} \right], \quad (6.61)$$

przy czym między dowolnym układem współrzędnych w (6.60) a układem osi głównych w ostatnim równaniu zachodzą związki [117]:

$$\left. \begin{aligned} D_{Txx} &= D_{TL} n_x^2 + D_{TH} n_y^2, \\ D_{Txy} &= D_{Tyx} = (D_{TL} - D_{TH}) n_x n_y, \\ D_{Tyy} &= D_{TL} n_y^2 + D_{TH} n_x^2, \end{aligned} \right\} \quad (6.62)$$

gdzie:

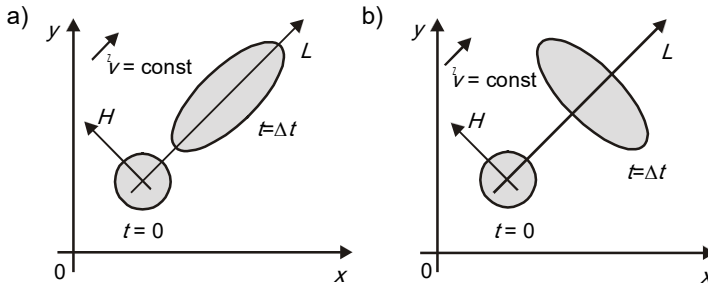
$$n_x = u_x / |\bar{\mathbf{u}}|, \quad n_y = u_y / |\bar{\mathbf{u}}|. \quad (6.63)$$

Gdy z kolei zastosujemy wspomniane wyżej „uproszczenie” zapisu, to otrzymamy niezgodne z zasadami teorii równanie „pośrednie”, w którym pominięto mieszane pochodne stężenia, postaci

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + \bar{u}_x \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} + \bar{u}_y \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left[(D_{Mi} + D_{Txx}) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left[(D_{Mi} + D_{Tyy}) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} \right]. \end{aligned} \quad (6.64)$$

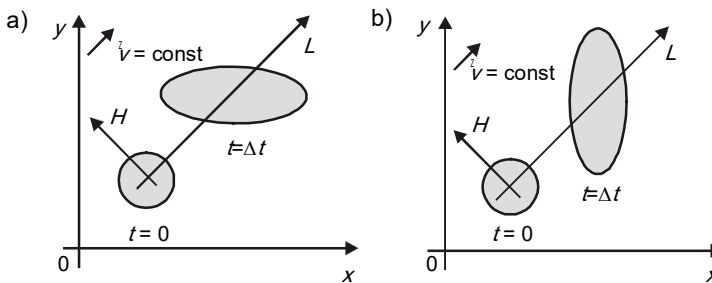
Przykładowe rozwiązanie zestawionych wyżej relacji ilustrują rys. 6.6 i 6.7. Zaznaczono na nich kształt obszaru, dla którego stężenie spełnia warunek $c_i/c_{i\max} \geq 0,1$. Jak widać, dla równań poprawnie sformułowanych, postaci (6.60) lub (6.61), otrzymujemy zgodny z mechanizmem omawianego zjawiska przebieg transformacji początkowego (przyjętego

jako kolisty) kształtu obszaru zanieczyszczonego. Wynik ten jest niezależny od tego, czy wybieramy dowolnie zorientowany układ współrzędnych x_0y (równ. (6.60)), czy też układ L_0H , określony przez kierunki główne (równ. (6.61)). Z kolei dla niepoprawnie zapisanego równania (6.64) mamy niezgodny z przewidywaniami fizycznymi rezultat – plama zanieczyszczeń ulega wydłużeniu skośnie względem kierunku wektora prędkości. Jest to konsekwencja niezłym nieuzasadnionego pominięcia mieszanych pochodnych stężenia w równaniu transportu.



Rys. 6.6. Transformacja stężenia początkowego wg poprawnych równań (6.60) lub (6.61)
(a – dla $D_{TL} > D_{TH}$, b – dla $D_{TL} < D_{TH}$)

Powyższy wynik nakazuje więc przeprowadzanie starannej analizy zagadnienia już na etapie jego formułowania. Równania, opisujące to zagadnienie, muszą być dobierane (w przypadkach typowych) lub wyprowadzane z równań ogólnych (w przypadkach nietypowych) ze świadomością wprowadzanych uproszczeń. Uproszczenia te muszą zarówno oddawać fizyczny sens badanego zagadnienia, jak też być poprawne pod względem formalnym. Nie należy stosować równań, zawierających niedopuszczalne (a często pozorne) uproszczenia, nawet pod presją oczekiwań na rozwiązanie problemu, gdyż otrzymany wynik może zbyt odzierać od rzeczywistości.



Rys. 6.7. Transformacja stężenia początkowego wg niepoprawnej zależności (6.64)
(a – dla $D_{Txx} > D_{Tyy}$, b – dla $D_{Txx} < D_{Tyy}$)

6.2.3.3. Wzory praktyczne dla przepływów jednokierunkowych. Analiza wyników badań oraz szczegółowych modeli dyfuzji burzliwej, prezentowanych w obszernej literaturze zagadnienia, pozwala stwierdzić, że interesujący nas tu proces wykazuje wyraźną *izotropię poprzeczną*. Oznacza to [170], że możliwe jest wyróżnienie pewnego kierunku przestrzeni (oznaczymy go symbolem \mathbf{n}_{pi}), dla którego intensywność dyfuzji burzliwej (określona pewną

wartością współczynnika transportu, specyficznego dla tego kierunku) jest inna, niż dla każdego z kierunków poprzecznych (prostopadłych) względem \mathbf{n}_{pi} . Dla każdego z tych kierunków mamy jednakową wartość współczynnika dyfuzji burzliwej (ale inną niż dla kierunku wyróżnionego).

W niniejszym punkcie zajmiemy się przypadkiem szczególnym (lecz częstym i ważnym praktycznie), gdy wektor prędkości ma (dokładnie lub w przybliżeniu) tylko jedną składową różną od zera (oznaczymy ją przez u_x). Celowe będzie wyróżnienie dwóch przypadków:

- 1) przepływ, w którym dominuje pionowe zróżnicowanie pola prędkości (objęty warstwą przyścienną, rozwiniętą ponad dnem rzeki, kanału lub płytkiego zbiornika);
- 2) przepływ, w którym dominuje poziome zróżnicowanie pola prędkości (występujący w obszarach wyraźnie trójwymiarowych, jak morza, oceany, czy atmosfera ziemską).

Podział powyższy nie jest na tyle precyzyjny, aby pozwalał zakwalifikować każdy możliwy przypadek. Jest on raczej próbą usystematyzowania propozycji, spotykanych w literaturze. Jego uzasadnienie fizykalne wiąże się ze strukturą zawirowań, będących konsekwencją turbulentnych fluktuacji prędkości.

Do pierwszej kategorii należą te przypadki, w których osie tych zawirowań są poziome i skierowane poprzecznie do kierunku niezerowej składowej wektora prędkości u_x . Jeżeli tradycyjnie przez Oz oznaczymy kierunek pionowy, to wyróżniony kierunek izotropii poprzecznej \mathbf{n}_{pi} jest wyznaczony wersorem \mathbf{j} osi Oy . W takiej sytuacji w relacji (6.57) mamy:

$$D_{TL} = D_{TV} = D_{Tx} = D_{Tz}; \quad D_{TH} = D_{Ty}. \quad (6.65)$$

Jak już wspomnieliśmy w punkcie 6.2.3.1, w praktycznych relacjach, opisujących wartości współczynnika dyfuzji burzliwej, z reguły przyjmuje się stałość tego parametru w czasie i w przestrzeni (uwzględniając jednak w wyżej opisany sposób jego zróżnicowanie kierunkowe), odnosząc go do iloczynu grubości warstwy cieczy h oraz prędkości dynamicznej v^* , określonej znanym z hydrauliki wzorem

$$v^* = \sqrt{\frac{\tau_d}{\rho}} = \sqrt{\frac{g}{C_{CH}}} v = \frac{n_M \sqrt{g}}{R_H^{1/6}} v \quad (6.66)$$

gdzie: (τ_d – naprężenie przyścienne, C_{CH} – współczynnik Chézy'ego, n_M – współczynnik Manninga, R_H – promień hydrauliczny).

Różni autorzy proponują różne wartości współczynników proporcjonalności w omawianych tu relacjach. Dla kierunków podłużnego i pionowego jako zalecaną można przyjąć następującą wersję [110]:

$$D_{Tx} = D_{TL} = D_{TV} = \frac{\kappa}{6} h v^* = 0,067 h v^*. \quad (6.67)$$

($\kappa = 0,4$, patrz (6.18)). W ujęciu dokładniejszym (gdy pragniemy uwzględnić przestrzenną zmienność współczynnika) proponuje się relację

$$D_{TL}(z) = D_{TH}(z) = 0,4 v^* z (1 - z/h). \quad (6.68)$$

Zależność (6.67) jest wartością średnią z (6.68).

Turbulentne mieszanie z definicji występuje wtedy, gdy stężenie substancji rozpuszczonej jest zmienne w przestrzeni. Zmienność ta, jeżeli dotyczy kierunku pionowego, po-

woduje dodatkowe konsekwencje. Są one związane z siłą wyporu. Miarą wpływu tego czynnika na proces mieszania jest *liczba Richardsona*

$$Ri = -g \frac{\partial \rho}{\partial z} / \rho \left(\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial z} \right)^2 \quad (6.69)$$

Określa ona stosunek siły wyporu do siły bezwładności. W uproszczeniu można występujące w (6.69) pochodne aproksymować ilorazem różnicowym, co daje

$$Ri_b = -g h \frac{\Delta \rho}{\rho (\Delta u)^2} \quad (6.70)$$

gdzie $\Delta \rho$ i Δu oznaczają odpowiednio różnice gęstości i prędkości między powierzchnią oraz dnem strumienia płynu.

Pionowa zmienność gęstości wpływa na wartość współczynnika dyfuzji burzliwej zgodnie z relacją

$$D_{Tzg} = D_{Tz} (1 + a Ri)^b, \quad (6.71)$$

gdzie D_{Tzg} – współczynnik pionowej dyfuzji burzliwej w warunkach zmiennej gęstości, zaś [110]:

$$\begin{aligned} a = 10/3, \quad b = -3/2 & \quad (\text{wg Munka i Andersona 1948}); \\ a = 1, \quad b = -2 & \quad (\text{wg Oficera 1976}); \\ a = 10/3, \quad b = -5/4 & \quad (\text{wg Schillera i Sayre'a 1975}). \end{aligned}$$

Pozostaje nam teraz określenie wartości współczynnika mieszania w kierunku poprzecznym D_{Ty} . Badania wykazują, że jest on około dwa razy większy od pozostałych ($D_{Tx} = D_{Tz}$). Opisuje się go relacją o strukturze identycznej z (6.67), w której współczynnik proporcjonalności, wyznaczany eksperymentalnie, leży w granicach 0,10 – 0,26. Jako wartość zalecaną przyjmuje się [110]

$$D_{Ty} = D_{TH} = 0,13 h v^*. \quad (6.72)$$

Przestrzenną zmienność tego współczynnika z reguły pomija się (tym bardziej, że jest ona jeszcze słabo rozpoznana).

W drugiej z omawianych tu kategorii przepływów osie turbulentnych wirów są zorientowane głównie pionowo, skutkiem czego $\mathbf{n}_{pi} = \mathbf{k}$ (\mathbf{k} – wersor osi $0z$). Oznacza to, że w (6.57) możemy przyjąć:

$$D_{TL} = D_{TH} = D_{Tx} = D_{Ty}; \quad D_{TV} = D_{Tz}. \quad (6.73)$$

Sposób podejścia do wyznaczenia tych współczynników jest w tym przypadku odmienny od zastosowanego dla poprzednio omówionej kategorii przepływów, których struktura kształtowana była przez warstwę przyścienną. Obecnie rozważamy przepływy w obszarach o dużej rozciągłości w każdym kierunku, podlegające złożonym oddziaływaniom dynamicznym, barycznym, gęstościowym i grawitacyjnym.

Wykorzystywany tu sposób opisu zjawiska bazuje na pracach L. F. Richardsona [106] i A. N. Kołmogorowa [58], a jego zasadniczym elementem jest pojęcie *skali geometrycznej* (lub *liniowej*) *przepływu*. Nie wnikając w rozbudowaną teorię tego pojęcia (np. [30, 33, 91]), w której wprowadza się ciągłe widmo skal liniowych, zdefiniujemy trzy takie wielkości, pojawiające się w rozważaniach nad strukturą turbulencji w rozległych obszarach. Pierwsza z nich, *skala Lagrange'a* l_L , opisuje dystans, wzdłuż którego zanika korelacja

pomiędzy burzliwymi fluktuacjami prędkości. Uwzględniając skalę czasową Lagrange'a T_L , wyrażoną przez relację (6.46), możemy tu napisać, że [68]

$$l_L = \| u' \| T_L, \quad (6.74)$$

gdzie symbol $\| u' \|$ określa średniokwadratową wartość pulsacji prędkości. W innym ujęciu skalę l_L możemy określić jako przeciętny wymiar największych wirów, generowanych przez przepływ główny [101], czyli jako *zewnętrzną skalę turbulencji*. Jest ona zbliżona wielkością do skali liniowej, określającej rozmiary zewnętrznych źródeł zasilania przepływu w energię. Jak widać, jest to pojęcie mocno spekulatywne, toteż przy braku pomiarów rzeczywistego pola prędkości nie może być wyznaczone z dużą dokładnością. Jeżeli nie mamy danych, pozwalających skorzystać z relacji (6.74), to wartość l_L można traktować jako tożsamą z drogą mieszania l_m , wprowadzoną w koncepcji Prandtla zależnością (6.18).

Dla skali Lagrange'a obliczyć można *lokalną liczbę Reynoldsa* Re_l

$$Re_l = \frac{\| u' \| l_L}{\nu}. \quad (6.75)$$

Na drugim końcu zakresu skal, charakteryzujących strukturę turbulencji, umieścić można *skalę Kolmogorowa*

$$l_K = \frac{l_L}{Re_l^{3/4}}. \quad (6.76)$$

Określa ona rząd wielkości najmniejszych wirów, w obrębie których obserwujemy już lepką dyssypację energii mechanicznej przepływu.

Ponadto w wyrażeniach, opisujących współczynnik dyfuzji turbulentnej, napotyka się jeszcze *pośrednią skalę Taylora* [68]

$$l_T = \frac{l_L}{Re_l^{1/2}}. \quad (6.77)$$

Drugim istotnym wskaźnikiem turbulencji jest *intensywność dyssypacji energii fluktuacji* ε . W dokładnym ujęciu jest ona definiowana zależnością (6.27). Może też być obliczona z równania transportu (6.30). W rozważanej tu klasie zagadnień często używa się uproszczonej aproksymacji tensora prędkości deformacji. Według [91] można tu posłużyć się uśrednionym gradientem prędkości poziomej, zgodnie z następującą relacją:

$$\varepsilon = 15\nu \overline{\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2}, \quad (6.78)$$

zaś w pracy [163] znaleźć można jeszcze prostszą propozycję, zgodnie z którą

$$\varepsilon = 15\nu \frac{u^2}{l_T^2}, \quad (6.79)$$

gdzie: u – moduł prędkości ruchu głównego, l_T – skala Taylora wg (6.77).

W nieco innym ujęciu intensywność dyssypacji ε wyrazić można przez moc sił grawitacji, jako iloczyn [88]

$$\varepsilon = u g i_j, \quad (6.80)$$

gdzie: i_f – spadek hydrauliczny (spadek linii energii) [134], dany wzorem

$$i_f = \frac{v^2}{C_{CH}^2} = \frac{v^{*2}}{gR_H}. \quad (6.81)$$

Zgodnie ze wspomnianą już koncepcją Richardsona, współczynnik dyfuzji burzliwej w omawianych tu przypadkach (oceany, atmosfera ziemska) jest proporcjonalny do skali zewnętrznej l_L w potęgę $4/3$, zaś współczynnik proporcjonalności uzależniony jest od ε , co wyraża tak zwane „prawo $4/3$ ”

$$D_T = A_D \varepsilon^{1/3} l_L^{4/3}. \quad (6.82)$$

Stały mnożnik A_D przyjmuje różne wartości, zależnie od lokalizacji obszaru, dla którego ma być wyznaczony. Należy go traktować jako parametr, określany indywidualnie dla rozważanego przypadku, o ile oczywiście pozwalają na to okoliczności i środki (konieczność przeprowadzenia pomiarów terenowych). Gdy nie ma takich możliwości, należy albo dobrać ten współczynnik z literatury, wykorzystując podobieństwa pomiędzy warunkami przypadków publikowanych a warunkami nas interesującymi (np. [6, 9, 12, 14, 52, 59]), albo wykorzystać wzory o uśrednionych współczynnikach. Dla dyfuzji w kierunkach poziomych można przyjmować [30, 91, 177]

$$D_{Tx} = D_{Ty} = D_{TL} = D_{TH} = 0,018 \left(\frac{l_L}{H} \right)^{1/3} \varepsilon^{1/3} l_L^{4/3}, \quad (6.83)$$

gdzie: H – głębokość akwenu,

zaś dla kierunku pionowego [88]

$$D_{Tz} = D_{TV} = 0,0136 \varepsilon^{1/3} l_L^{4/3}. \quad (6.84)$$

Jeżeli mamy podstawy sądzić, że dyfuzja pionowa spowodowana jest głównie falowaniem powierzchni wody, wtedy [65, 177]

$$D_{Tz} = D_{TV} = 0,02 h_f^2 / T_f, \quad (6.85)$$

gdzie: h_f , T_f – średnia wysokość i średni okres fali.

Można też zastosować wzory (6.102) i (6.103), gdy mieszanie turbulентne powodowane jest prądami generowanymi wiatrem (przy czym odnoszą się one do przypadku izotropowego).

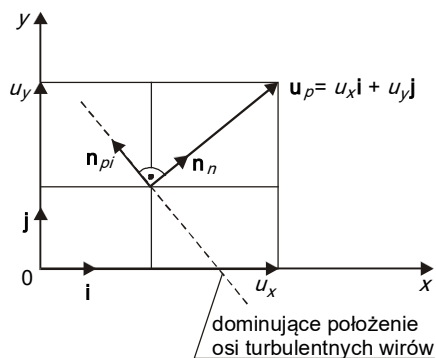
6.2.3.4. Ogólny przypadek izotropii poprzecznej. W poprzednim punkcie omówiliśmy wzory, pozwalające na obliczenie współczynników dyfuzji burzliwej gdy wektor prędkości średniej ma jedną składową poziomą, określającą jedną z osi głównych procesu migracji zanieczyszczeń. Jest to przypadek bardzo przydatny w praktyce, lecz możemy też mieć do czynienia z taką sytuacją, gdy wektor prędkości zmienia swój kierunek w przestrzeni. Należy wtedy zapisać równanie transportu w postaci ogólnej. Wykorzystując omówioną już cechę *izotropii poprzecznej* możemy ogólną postać prawa Ficka dla takiego przypadku otrzymać za pomocą teorii reprezentacji funkcji tensorowych [134, 170].

Dla pierwszej z omówionych w poprzednim punkcie kategorii przepływu, gdy dominują w nim wiry o osi poziomej, możemy charakterystyczny kierunek izotropii \mathbf{n}_{pi} wyrazić następującą relacją:

$$\mathbf{n}_{pi} = - \frac{u_y}{u_p} \mathbf{i} + \frac{u_x}{u_p} \mathbf{j}. \quad (6.86)$$

Jest to bowiem wektor jednostkowy, prostopadły do wektora jednostkowego \mathbf{n}_u , wyznaczonego przez poziomą składową wektora prędkości (rys. 6.8), zgodnie z zależnością

$$\mathbf{n}_n = \frac{u_x}{u_p} \mathbf{i} + \frac{u_y}{u_p} \mathbf{j}. \quad (6.87)$$



Rys. 6.8. Charakterystyczny kierunek izotropii poprzecznej w przypadku wirów o osi poziomej

Wektor ten wygodnie jest zastąpić *tensorem izotropii poprzecznej*

$$[N_{pi}] = \mathbf{n}_{pi} \otimes \mathbf{n}_{pi} = \begin{bmatrix} \frac{u_y^2}{u_p^2} & -\frac{u_x u_y}{u_p^2} & 0 \\ -\frac{u_x u_y}{u_p^2} & \frac{u_x^2}{u_p^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.88)$$

W myśl koncepcji, przedstawionej w poprzednim punkcie, jednostkowy strumień masy i -tej substancji rozproszonej, spowodowany turbulentną dyfuzją, jest liniową funkcją gradientu uśrednionego w czasie stężenia \bar{c}_i oraz tensora $[N_{pi}]$, czyli

$$\mathbf{m}_{Ti} = \mathbf{m}_{Ti}(\text{grad } \bar{c}_i, [N_{pi}]). \quad (6.89)$$

Skoro wyniki obserwacji i pomiarów, poparte rozważaniami teoretycznymi, pozwalają przyjąć poprzeczną izotropię procesu, to zgodnie z teorią reprezentacji [170] mamy

$$\mathbf{m}_{Ti} = H_1 \text{grad } \bar{c}_i + H_2 [N_{pi}] \text{grad } \bar{c}_i + H_3^2 [N_{pi}]^2 \text{grad } \bar{c}_i. \quad (6.90)$$

gdzie H_1 , H_2 , i H_3 są współczynnikami skalarnymi.

Jak łatwo sprawdzić, w rozważanym przypadku mamy

$$[N_{pi}]^2 = [N_{pi}], \quad (6.91)$$

toteż w relacji (6.90) wystąpią tylko dwa współczynniki H_1 oraz $(H_2 + H_3)$. Możemy je bez trudu wyznaczyć, na podstawie znanych już ich odpowiedników dla ruchu jednokierunkowego. Sytuując kierunek $0x$ zgodnie z wektorem prędkości poziomej \mathbf{u}_p , możemy napisać, że

$$\mathbf{m}_{Ti} = H_1 \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} \mathbf{i} + (H_1 + H_2 + H_3) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} \mathbf{j} + H_1 \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} \mathbf{k}. \quad (6.92)$$

Z porównania (6.58) i (6.92) mamy

$$H_1 = -D_{TL}, H_2 + H_3 = D_{TL} - D_{TH}. \quad (6.93)$$

Ostateczna postać prawa Ficka dla rozważanego tu przypadku wygląda więc następująco (tensor $[N_{pi}]$ – relacja (6.88)):

$$\mathbf{m}_{Ti} = -D_{TL} \text{grad } \bar{c}_i + (D_{TL} - D_{TH}) [N_{pi}] \text{grad } \bar{c}_i. \quad (6.94)$$

Sposób wyznaczenia współczynników D_{TL} i D_{TH} omówiliśmy poprzednio (np. wzory (6.67) i (6.72)).

W niemal identyczny sposób możemy wyprowadzić interesującą nas relację dla drugiej klasy przypadków, gdy wyróżnionym kierunkiem izotropii poprzecznej jest pion. Mamy wtedy

$$\mathbf{n}_{pi} = \mathbf{k}, \quad (6.95)$$

zamiast (6.88) otrzymujemy

$$[N_{pi}] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (6.96)$$

a zamiast (6.92) mamy

$$\mathbf{m}_{Ti} = H_1 \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} \mathbf{i} + H_1 \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} \mathbf{j} + (H_1 + H_2 + H_3) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} \mathbf{k}. \quad (6.97)$$

Uwzględniając w powyższym (6.73), mamy:

$$H_1 = -D_{TL}, \quad H_2 + H_3 = D_{TL} - D_{TV}, \quad (6.98)$$

a prawo Ficka ma wtedy postać ($[N_{pi}]$ – relacja (6.96))

$$\mathbf{m}_{Ti} = -D_{TL} \text{grad } \bar{c}_i + (D_{TL} - D_{TV}) [N_{pi}] \text{grad } \bar{c}_i. \quad (6.99)$$

Współczynniki D_{TL} i D_{TV} wyznaczyć tu można ze wzorów (6.83) i (6.84), lub równorzędnych.

6.2.3.5. Dyfuzja burzliwa w przypadku izotropowym. Współczynnik dyfuzji burzliwej D_T jest tu funkcją skalarną. W odniesieniu do (6.58) mamy

$$D_{TL} = D_{TH} = D_{TV} = D_T. \quad (6.100)$$

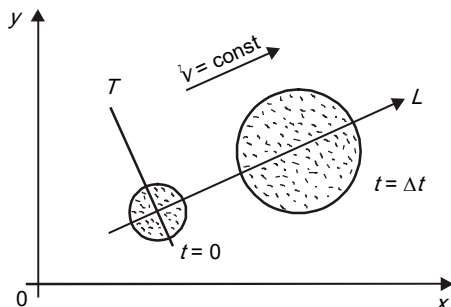
Równanie burzliwej dyfuzji (6.36) ma wtedy postać

$$\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}}\nabla)\bar{c}_i = \text{div}[(D_{Mi} + D_T) \text{grad } \bar{c}_i] + \bar{Z}_i. \quad (6.101)$$

Zmiana kształtu obszaru zanieczyszczonego odbywa się w takim przypadku z jednakową intensywnością we wszystkich kierunkach (rys. 6.9, patrz też rozwiązanie (4.342) oraz rys. 6.6 i 6.7).

Wartość D_T wobec (6.54) i (6.55) można obliczyć za pomocą tych samych wzorów, które określają współczynnik lepkości burzliwej (patrz par. 6.1.4), lub wyznaczyć doświad-

czalnie (patrz następny punkt). Można też wykorzystać różnego rodzaju propozycje indywidualne (o ile zostały opracowane dla warunków, odpowiadających analizowanej przez nas sytuacji), prezentowane w cytowanych już pozycjach literatury.



Rys. 6.9. Transformacja stężenia początkowego w przypadku izotropowej dyfuzji burzliwej

W szczególnym, lecz ważnym praktycznie, przypadku, gdy turbulencja generowana jest przez działanie wiatru na swobodną powierzchnię zbiornika wody (morza, oceanu), pożyteczne są następujące wzory [36, 52]:

$$D_T = 0,000054 w H \text{ (gd}y H < H_z), \quad (6.102)$$

$$D_T = 0,000000047 w^2/\Omega \text{ (gd}y H > H_z), \quad (6.103)$$

gdzie głębokość krytyczna

$$H_z = 0,00087 w/\Omega, \quad (6.104)$$

zaś Ω oznacza *parametr Coriolisa* [29]

$$\Omega = 2 \omega \sin \varphi_G \quad (6.105)$$

(ω – prędkość kątowa obrotu Ziemi, φ_G – szerokość geograficzna rozważanego akwenu).

6.2.3.6. Wyznaczanie współczynnika dyfuzji burzliwej na podstawie pomiarów. Jak wynika z dotychczasowych rozważań, teoria współczynników mieszania burzliwego nie jest zamknięta. Istnieje kilka grup metod ich wyznaczania, a sposób wyboru konkretnej z nich jest zawsze obciążony istotnym ładunkiem dowolności. Interesującą alternatywę stanowi więc możliwość indywidualnego określania takiego współczynnika dla rozważanego układu, na podstawie wyników uprzednich pomiarów stężenia znacznika, wprowadzonego do płynu.

Istnieją dwie kategorie tego typu metod. Pierwsza z nich, którą można nazwać *lokalną*, bazuje na analizie struktury pól stężenia oraz/lub prędkości rzeczywistych. W klasycznej wersji, stosowanej przez A. Einsteina przy badaniu ruchów Browna, jako kluczowe narzędzie przyjmuje się wariancję stężenia σ_c^2 (patrz par. 6.2.2 i wzory (6.42)–(6.45)), co pozwala następująco opisać współczynnik dyfuzji [88]:

$$D_T = \frac{1}{2} \frac{d(\sigma_c^2)}{d t} \quad (6.106)$$

Inne podejście reprezentuje G. I. Taylor [160], który jako wymiar charakterystyczny w (6.41) przyjął skalę liniową Lagrange'a, proponując zależność (T_L – patrz (6.46))

$$D_T = \| u' \|^2 T_L. \quad (6.107)$$

Druga kategoria omawianych tu metod ma charakter *globalny*, gdyż wykorzystuje się w niej pomiary rozkładów stężenia, które są materiałem porównawczym dla rozwiązań równań transportu [158]. W obliczeniowym procesie *identyfikacji* tak dobiera się wartość współczynnika dyfuzji burzliwej, aby oba rozkłady stężenia (obliczony i zmierzony) były odpowiednio bliskie sobie.

6.2.4. Zestawienie roboczych wersji równania burzliwej dyfuzji

W poprzednich paragrafach niniejszego podrozdziału omówiliśmy dwa zasadnicze etapy wyprowadzania równań burzliwego transportu masy. Pierwszy z nich poświęcony jest matematycznemu zapisowi prawa zachowania masy *i*-tej substancji rozproszonej, zaś drugi – równaniu konstytutywnemu dla turbulentnego strumienia masy, którym jest prawo Ficka w swej wersji dla ruchu burzliwego. Istotnym elementem tego drugiego etapu było zwrócenie uwagi na zróżnicowanie istniejących metod opisu współczynnika burzliwej dyfuzji. Przejawia się ono z jednej strony w rodzaju tego współczynnika (skalar dla dyfuzji izotropowej, zaś tensor dla dyfuzji anizotropowej), a z drugiej – w postaci konkretnych wzorów, określających jego wartość.

Mając wyrobiony pogląd na omawiane tu zagadnienie, możemy dobierać robocze wersje równań burzliwej dyfuzji, stosownie do indywidualnych cech rozważanego problemu. Najprostszą z takich wersji otrzymamy wtedy, gdy możliwe jest założenie izotropii procesu oraz stałości współczynnika dyfuzji burzliwej. Podstawiając (6.52) do (6.36), przy warunku (4.191), otrzymamy następującą relację:

$$\frac{D \bar{c}_i}{D t} = (D_{M_i} + D_T) \Delta \bar{c}_i + \bar{Z}_i. \quad (6.108)$$

Podkreślmy tutaj, że założenie $D_T = \text{const}$ jest sprzeczne z mechanizmem turbulentnej wymiany masy, pędu i energii (którego intensywność jest w istotnym stopniu zmienna w przestrzeni). Jak jednak pokazują przykłady zastosowań równań migracji zanieczyszczeń [110], proces dyfuzji jest mniej wrażliwy na pominięcie zmienności D_T , niż proces wymiany pędu na przyjęcie założenia $v_T = \text{const}$. Uwzględniając ponadto ułatwienia formalne, które przynosi warunek $D_T = \text{const}$, możemy relację (6.108) traktować jako miarę dopuszczalnego kompromisu między fizykalną poprawnością opisu zjawiska, a wymogami praktyki.

W pełni poprawną wersję omawianego tu równania otrzymamy, jeżeli przy założeniu izotropii uwzględnimy jednak przestrzenną zmienność współczynnika dyfuzji burzliwej. Pozwala to następująco zapisać równanie migracji *i*-tej substancji rozpuszczonej:

$$\frac{D \bar{c}_i}{D t} = \text{div}[(D_{M_i} + D_T) \text{grad } \bar{c}_i] + \bar{Z}_i. \quad (6.109)$$

Z modeli anizotropowych w praktyce najczęściej stosuje się dwa. Pierwszy z nich dotyczy przepływu wzdłuż powierzchni zorientowanej horyzontalnie (gdy dominuje poziomy kierunek osi turbulentnych wirów). Podstawiając (6.94) do (6.36) otrzymamy następującą wersję równania transportu (w układzie kartezjańskim, gdy oś 0z jest skierowana pionowo w górę):

$$\begin{aligned} \frac{D\bar{c}_i}{Dt} = & \frac{\partial}{\partial x} \left\{ [(D_{Mi} + D_{TL} - (D_{TL} - D_{TT})n_y^2) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} + [(D_{TL} - D_{TT})n_x n_y] \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y}] \right\} + \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ [(D_{TL} - D_{TT})n_x n_y] \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} + [(D_{Mi} + D_{TL} - (D_{TL} - D_{TT})n_x^2) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y}] \right\} + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ (D_{Mi} + D_{TL}) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} \right\} + \bar{Z}_i. \end{aligned} \quad (6.110)$$

Składowe n_x i n_y wektora kierunkowego \mathbf{n} określone są tu relacjami

$$n_x = u_x / \sqrt{u_x^2 + u_y^2}, \quad n_y = u_y / \sqrt{u_x^2 + u_y^2}. \quad (6.111)$$

Symbol D_{TL} oznacza współczynnik dyfuzji burzliwej w kierunku poziomej składowej wektora prędkości (rys. 6.8), równy współczynnikowi w kierunku jego składowej pionowej (np. według relacji (6.67)). Natomiast symbol D_{TT} oznacza współczynnik dyfuzji burzliwej w kierunku poziomym, poprzecznym względem \mathbf{u}_p (np. wg (6.72)).

Drugi z modeli anizotropowych odnosi się do sytuacji, gdy wyróżnionym kierunkiem mieszania jest pion. Podstawiając równania konstytutywne (6.99) do (6.36), mamy wtedy (w układzie kartezjańskim, przy pionowej osi $0z$)

$$\begin{aligned} \frac{D\bar{c}_i}{Dt} = & \frac{\partial}{\partial x} \left[(D_{Mi} + D_{TL}) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[(D_{Mi} + D_{TL}) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[(D_{Mi} + D_{TV}) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} \right] + \bar{Z}_i. \end{aligned} \quad (6.112)$$

Współczynnik mieszania w kierunku poziomym D_{TL} wyznaczyć można na przykład ze wzoru (6.83), zaś wartość D_{TV} dla kierunku pionowego – ze wzoru (6.84).

6.3. Burzliwa wymiana ciepła

6.3.1. Przekształcenie równania przewodzenia ciepła

Zależność opisującą przenoszenie ciepła w ruchu burzliwym otrzymujemy z równania zachowania energii (4.189), które wobec (4.191) napiszemy w następującej postaci:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{u} T) = D_W \Delta T + q_{es}. \quad (6.113)$$

W ruchu turbulentnym możemy przedstawić temperaturę T w postaci sumy jej wartości średniej \bar{T} oraz części fluktuacyjnej T' , pisząc

$$T = \bar{T} + T'. \quad (6.114)$$

Eliminację składowych fluktuacyjnych temperatury T' oraz prędkości \mathbf{u}' (6.32) prowadzimy identycznie jak w przypadku równania transportu masy i -tej substancji rozpuszczonej. Korzystając ze szczegółowej prezentacji tej metody w par. 6.2.1, tutaj możemy ograniczyć się tylko do wypunktowania jej podstawowych etapów.

Tak więc podstawiając (6.32) i (6.114) do (6.113), wykonując możliwe operacje matematyczne i uśredniając obie jego strony zgodnie z (6.2), otrzymamy następujące wyrażenie:

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \nabla) \bar{T} = D_w \Delta \bar{T} + \text{div}(-\mathbf{q}_T) + \bar{q}_{es}. \quad (6.115)$$

Symbol \mathbf{q}_T określa *jednostkowy burzliwy strumień energii cieplnej* \mathbf{q}_{Td} , podzielony przez gęstość płynu ρ oraz przez jego ciepło właściwe C_w . Zdefiniowany jest on jako uśredniony iloczyn wielkości fluktuacyjnych

$$\frac{\mathbf{q}_{Td}}{\rho C_w} = \mathbf{q}_T = \overline{T \mathbf{u}'}. \quad (6.116)$$

Wynika to z interpretacji powyższego członu, prowadzonej analogicznie jak dla przypadku wymiany masy (rys. 6.4). Musimy tu pamiętać, że równanie (6.113) otrzymujemy z (4.83), uwzględniając dzielenie przez (ρC_w) .

6.3.2. Prawo Fouriera dla ruchu turbulentnego

Omówiona już w podrozdziale 6.1 analogia pomiędzy „chaosem molekularnym” a „chaosem turbulentnym”, wraz z rozumowaniem L. Prandtla (rys. 6.2), wyrażonym relacją (6.7), pozwalają w przypadku jednowymiarowym (np. w kierunku osi $0y$) napisać, że

$$q_{Ty} = \overline{u'_y J'_m} \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} = -D_{WT} \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} = -D_T \frac{\partial \bar{T}}{\partial y}. \quad (6.117)$$

Jest to podstawa do wyartykułowania następującego *prawa Fouriera dla burzliwego przewodzenia ciepła*:

Jednostkowy burzliwy strumień energii jest liniową i jednorodną funkcją gradientu uśrednionej w czasie temperatury płynu.

Nie możemy tutaj przyjąć, jak mogliśmy to uczynić w przypadku prawa Fouriera dla molekularnego przewodzenia ciepła (4.99), że jest to proces przebiegający w jednakowy sposób w każdym kierunku przestrzeni. Z tego względu musimy w ogólnym przypadku uwzględnić anizotropię procesu, zapisując wyżej sformułowane prawo w postaci następującego równania konstytutywnego:

$$\mathbf{q}_{Td} = \mathbf{q}_T \rho C_w = -[\lambda_T] \text{grad } \bar{T}. \quad (6.118)$$

W szczególnym przypadku, gdy możliwe jest przyjęcie izotropii procesu, mamy

$$\mathbf{q}_{Td} = -\lambda_T \text{grad } \bar{T}. \quad (6.119)$$

6.3.3. Współczynnik turbulentnego wyrównywania temperatury

Występujący w równaniu (6.117) współczynnik proporcjonalności oznaczyliśmy najpierw symbolem D_{WT} , oznaczającym *współczynnik turbulentnego wyrównywania temperatury*, lecz zaraz potem użyliśmy symbolu D_T , identycznego z oznaczeniem współczynnika turbulentnej dyfuzji. Wynika to z faktu, że struktura każdego z nich jest identyczna i określona przez uśredniony iloczyn fluktuacji prędkości i drogi mieszania l_m .

Jest to niezwykle ważna informacja. Oznacza ona, że do wyznaczenia wartości D_{WT} możemy wykorzystać wszystkie metody, omówione w par. 6.2.3. Co prawda w relacjach (6.118) i (6.119) użyliśmy symbolu λ_T , określającego *współczynnik turbulentnego przewodzenia ciepła*, ale wynikało to z fizycznego sensu tych równań, określających wersje prawa Fouriera dla ruchu burzliwego. Wobec (4.180) możemy λ_T i $D_{WT} = D_T$ przeliczać wzajemnie, zgodnie z relacją

$$\lambda_T = D_{WT} \rho C_w. \quad (6.120)$$

6.3.4. Robocze wersje równania burzliwego przewodzenia ciepła

Konsekwentnie, również robocze wersje równania burzliwego przenoszenia ciepła są pod względem formalnym identyczne z odpowiednimi wersjami równań burzliwej dyfuzji. Najprostsza z tych relacji, gdy zjawisko traktujemy jako izotropowe i zakładamy stałość współczynników transportu, ma następującą postać:

$$\frac{D \bar{T}}{D t} = (D_W + D_T) \Delta \bar{T} + \bar{q}_{es}. \quad (6.121)$$

Jeżeli w warunkach izotropowych chcemy uwzględnić zmienność współczynnika burzliwego transportu, wtedy analogicznie do (6.109) mamy

$$\frac{D \bar{T}}{D t} = \text{div}[(D_W + D_T) \text{grad } \bar{T}] + \bar{q}_{es}. \quad (6.122)$$

Dwie pozostałe z podstawowych roboczych wersji rozważanej tu relacji (dla izotropii poprzecznej, odpowiednio względem kierunku poziomego i pionowego) otrzymamy z równań (6.110) i (6.112), zastępując w nich uśrednione stężenie \bar{c}_i przez uśrednioną temperaturę \bar{T} , współczynnik dyfuzji molekularnej D_{Mi} przez współczynnik molekularnego wyrównywania temperatury D_W , zaś funkcję źródłową \bar{Z}_i przez funkcję \bar{q}_{es} .

6.4. Równanie burzliwego transportu wielkości skalarnej

Podobnie jak w przypadku adwekcji z prędkością rzeczywistą oraz mieszania molekularnego (podrozdz. 4.8, równ. (4.195)), również obecnie, gdy rozważamy adwekcję z prędkością uśrednioną względem czasu oraz mieszanie burzliwe, w rozważaniach ogólnych niekiedy dogodnie jest posługiwać się uogólnionym pojęciem *burzliwego transportu uśrednionej wielkości skalarnej* s_p . Równanie to można zapisać następująco:

$$\frac{D \bar{s}_p}{D t} = \text{div}(D_{TS} \text{grad } \bar{s}_p) + \bar{Z}_S. \quad (6.123)$$

Symbol D_{TS} oznacza tu uogólniony współczynnik burzliwego mieszania wielkości skalarnej \bar{s}_p ($\bar{s}_p = \bar{c}_i$ lub $\bar{s}_p = \bar{T}$). Szczegółowe wersje tego równania otrzymamy bez trudu, wykorzystując omówione w tym rozdziale zasady.

6.5. Migracja zanieczyszczeń w ruchu turbulentnym

6.5.1. Sposób formułowania zagadnienia

Ze względu na formalną identyczność równań transportu w warunkach rzeczywistych oraz w warunkach ruchu burzliwego, w mocy pozostają wszystkie uwagi, dotyczące zasad określania brzegu rozważanego obszaru (w szczególności – zasad wprowadzania *brzegu matematycznego*) oraz dotyczące sposobu stawiania warunków początkowych i brzegowych (podrozdz. 4.11). Pewne praktyczne zróżnicowanie powoduje tu fakt, że współczynnik dyfuzji molekularnej D_M jest o kilka rzędów wielkości mniejszy od współczynnika dyfuzji burzliwej D_T . Przykładowo, dla zbiornika wodnego o głębokości $h = 5,0$ m i współczynnika szorstkości wg Manninga $n_M = 0,02$, mamy zgodnie z (6.66) prędkość dynamiczną rzędu $v^* = 0,07 v$. Przy prędkości przepływu wody rzędu $v = 0,10$ m/s mamy zgodnie z (6.67) współczynnik dyfuzji burzliwej równy $D_T = 2,35 \cdot 10^{-3}$ m²/s. Tymczasem wartość współczynnika dyfuzji molekularnej jest rzędu $D_M = 10^{-9}$ m²/s (tablica 7).

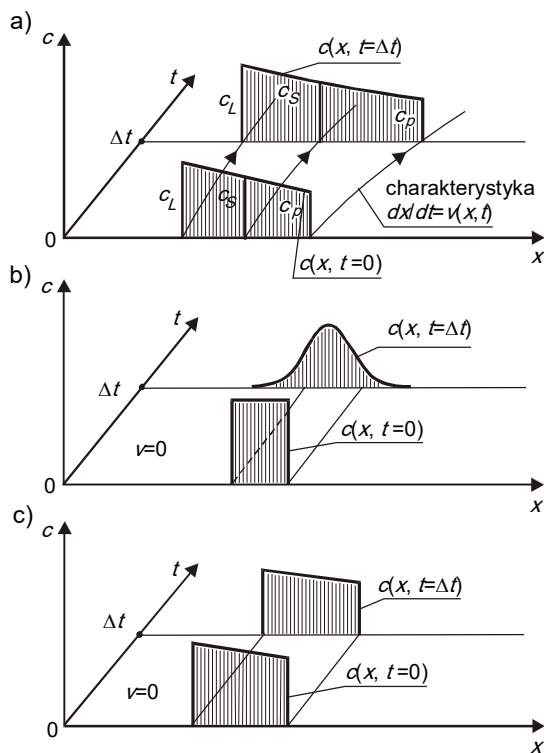
Jeżeli więc wprowadzamy do równań jakieś uproszczenia, wynikające z wielkości współczynnika dyfuzji (na przykład, gdy korzystając z jego małej wartości liczbowej decydujemy się na przyjęcie warunku Neumanna (4.276) w wersji uproszczonej), to zdecydowanie bardziej będzie to uzasadnione dla dyfuzji molekularnej, niż turbulentnej.

6.5.2. Rozwiązywanie zagadnień

6.5.2.1. Uwagi ogólne. W zasadzie można tu prawie bez zmian powtórzyć wszelkie rozważania, zawarte w podrozdz. 4.12. Pewne różnice, drobne pod względem poznawczym, choć niekiedy istotne praktycznie, są konsekwencją wspomnianej już dysproporcji między wartościami obu współczynników dyfuzji, a także zmienności D_T w przestrzeni i jego tensorowego charakteru w przypadkach anizotropowych (patrz też pkt 4.12.2.8).

6.5.2.2. Rozwiązania analityczne. Omówione w par. 4.12.2 rozwiązania kolejnych wersji jednowymiarowego równania adwekcji-dyfuzji otrzymano dla stałych wartości współczynnika molekularnego transportu wielkości skalarnej D_S . Tymczasem współczynnik przeniesienia turbulentnego jest zmienny w przestrzeni. Na szczęście zmienność ta nie jest na tyle znaczna, by całkowicie wykluczyć dopuszczalność założenia $D_T = \text{const}$ (patrz par. 6.2.3). Z pewnością możemy więc przynajmniej wykorzystać wnioski z otrzymanych poprzednio rozwiązań, dotyczące sposobu, w jaki przejawia się wpływ każdego z procesów jednostkowych. Wnioski te można sformułować następująco:

- *adwekcja* powoduje przemieszczenie się wartości stężenia oraz/lub temperatury wzdłuż charakterystyk $dx_k/dt = v_k$ ($k = x, y, z$), bez zmiany tej wartości (przy czym w zmiennym polu prędkości kształt obszaru zanieczyszczonego ulega zmianie) – rys. 6.10a;
- *dyfuzja* powoduje „spłaszczanie” początkowego rozkładu stężenia oraz/lub temperatury; zasięg obszaru zanieczyszczonego wzrasta, a zróżnicowanie stężenia i temperatury maleje – rys. 6.10b;
- *czynniki źródłowe* powodują spadek (przy reakcjach rozkładu) lub wzrost (przy reakcjach produkcji) wartości stężenia oraz/lub temperatury, bez zmiany wielkości ani kształtu obszaru zanieczyszczonego – rys. 6.10c.



Rys. 6.10. Wpływ procesów jednostkowych na zmiany rozkładu stężenia
(a – adwekcja, b – dyfuzja, c – procesy źródłowe)

Co więcej, opisane – otrzymanymi w par. 6.12.2 funkcjami – procesy również pod względem ilościowym wykazują niezłą zgodność z obserwacjami (oczywiście pod warunkiem zastąpienia w tych funkcjach D_S przez współczynnik dyfuzji turbulentnej D_T). Tym samym można je stosować, z całą pewnością w obliczeniach wstępnych lub orientacyjnych. Gdy wymagana jest większa dokładność obliczeń, wtedy należy uwzględnić zmienność D_T (co praktycznie uniemożliwia uzyskanie rozwiązania w postaci analitycznej).

6.5.2.3. Uproszczony model ustalonego zrzutu zanieczyszczeń w obszarze nieograniczonym.

Wszystkie rozwiązania, przedstawione w par. 4.12.2, odnoszą się do zjawiska zachodzącego w przestrzeni jednowymiarowej (wzdłuż strumienia cieczy, w którego każdym przekroju poprzecznym wszystkie wielkości fizyczne mają wartość stałą). Rzeczywiste zagadnienia mają charakter bardziej złożony, są trójwymiarowe i trójkierunkowe. Ich modele natomiast staramy się konstruować tak, by były możliwie najprostsze pod względem formalnym, lecz możliwie najdokładniejsze pod względem fizycznym. Innymi słowy, staramy się w nich pozostawiać tylko te człony, które w danym przypadku są rzeczywiście niezbędne. Ogólną metodę oceny wielkości poszczególnych członów przedstawiliśmy w rozdz. 5 (dla przepływu rzeczywistego i dyfuzji molekularnej, lecz opisane tam procedury można bez trudu zastosować do przepływu uśrednionego i dyfuzji burzliwej – patrz przykład 5.1). Liczba możliwych wersji równań uproszczonych jest na tyle znaczna, że niecelowa jest ich systematyczna analiza.

Jednakże jedna z takich wersji jest na tyle istotna, że omówimy ją szczegółowo poniżej (w dwóch odmianach).

Model ten dotyczy ustalonego, ciągłego zrzutu zanieczyszczeń (materialnych lub termicznych) z wylotu liniowego (wariant I) lub punktowego (wariant II). Strumień opuszczający ten wylot zorientowany jest wzdłuż wektora prędkości w odbiorniku. Prędkość wylotową samego strumienia ścieków będziemy pomijali (czyli przyjmujemy, że wprowadzony do odbiornika strumień cieczy zanieczyszczonej wpływa na rozkład stężenia oraz/lub temperatury wody, lecz nie wpływa na jej prędkość). Założmy też, że funkcje źródłowe można pominąć (rozważamy zanieczyszczenia nierozkładalne).

Przyjmijmy teraz, że intensywność adwekcji zanieczyszczeń w kierunku $0x$ jest na tyle duża, że możemy pominąć w tym kierunku mieszanie spowodowane dyfuzją burzliwą. Podkreślimy, że dopuszczalność tego założenia w konkretnych przypadkach musimy sprawdzić, korzystając najlepiej z bezwymiarowych postaci równań transportu (5.21) lub (5.27).

W pierwszej kolejności rozważmy źródło liniowe, usytuowane wzdłuż osi $0z$. W takim przypadku stężenie rozważanych zanieczyszczeń (lub temperatura wody w odbiorniku) będzie się zmieniało tylko w płaszczyźnie $x0y$, a równanie transportu przyjmie następującą postać (dodatkowo zakładamy $u_x = \text{const}$ i $D_T = \text{const}$):

$$u_x \frac{\partial c}{\partial x} = D_T \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}. \quad (6.124)$$

Zauważmy, że jest ono formalnie bardzo podobne do równania (4.301). Różnica, bardzo istotna fizycznie, polega na tym, że zamiast czasu t występuje tu zmienna przestrzenna x , zmienna y zamiast x , oraz mamy tu iloraz D_T/u_x zamiast D_S w (4.301). Ponadto $s_p = c$. Ostatnim z parametrów, które wymagają tu przeliczenia, jest intensywność impulsu M (patrz równ. (4.315) oraz uproszczona relacja (4.316)). W rozważanym teraz przypadku mamy do czynienia z ciągłą emisją ustalonego strumienia masy zanieczyszczeń o natężeniu m_z . Jeżeli różnica między stężeniem rozważanej substancji w punkcie początkowym (x_0, y_0) a stężeniem tła jest równa Δc_M , szerokość strumienia wynosi Δx_M , a miąższość warstwy cieczy wynosi b , to uwzględniając (4.316) mamy oczywistą relację (uwaga: prędkość strumienia cieczy zanieczyszczonej jest tu z założenia równa prędkości otoczenia u_x)

$$m_z = c_0 Q_z = c_0 u_x b \Delta x = M u_x b. \quad (6.125)$$

Tak więc w rozważanym przypadku możemy występującą w (4.317) intensywność impulsu M zastąpić przez masowy wydatek źródła zanieczyszczeń m_z , pisząc

$$M = m_z/(u_x b). \quad (6.126)$$

Jeżeli rozważany obszar jest na tyle rozległy, że możemy potraktować go jako nieograniczony (patrz rys. 4.41), to przy powyższych zastrzeżeniach rozwiązanie równania (6.124) otrzymamy bezpośrednio z (4.317). Ma ono postać funkcji

$$c(x, y) = \frac{m_z}{2b\sqrt{\pi D_T x u_x}} \exp\left(-\frac{u_x y^2}{4D_T x}\right). \quad (6.127)$$

W drugiej odmianie rozważanego tu wariantu ogólnego modelu migracji zanieczyszczeń przyjmijmy, że ustalony strumień wprowadzonej do odbiornika cieczy zanieczyszczono-

nej pochodzi ze źródła punktowego o współrzędnych ($x = 0, y = y_0, z = z_0$). Wykorzystując powtórnie już omówione założenia, otrzymamy równanie transportu w następującej postaci:

$$u_x \frac{\partial c}{\partial x} = D_{TH} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_{TV} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}. \quad (6.128)$$

Tym razem wykazuje ono formalne podobieństwo do relacji (4.341), w której zamiast czasu t mamy zmienną przestrzenną x , współczynniki dyfuzji burzliwej są zróżnicowane poprzecznie (typ anizotropii, omówiony w punkcie 6.2.3.2), a pozostałe różnice omówiono przed podaniem relacji (6.127). Rozwiązanie równania (6.128), otrzymane analogicznie jak rozwiązanie (4.342) dla równania (4.341), ma teraz postać

$$c(x, y, z) = m_Z \frac{\exp\left[-\frac{u_x(y-y_0)^2}{4D_{TH}x}\right] \exp\left[-\frac{u_x(z-z_0)^2}{4D_{TV}x}\right]}{2\pi x \sqrt{D_{TH}D_{TV}}}. \quad (6.129)$$

6.5.2.4. Metoda odbić zwierciadlanych. Omówione w poprzednim punkcie relacje uzyskano po wprowadzeniu kilku założeń upraszczających, z których szczególnie istotne są dwa:

- 1) obszar jest nieograniczony (czyli brzeg tego obszaru jest na tyle odległy, że można pominąć jego wpływ na pole stężenia oraz/lub temperatury płynu),
- 2) prędkość adwekcji u_x może być traktowana jako stała.

Sytuacja komplikuje się jednak wtedy, gdy założenie o nieskończonych rozmiarach obszaru nie może być przyjęte, czyli gdy przynajmniej część zanieczyszczonej partii cieczy zbliża się do brzegu obszaru. Rozwiązanie równania transportu jest wtedy uzależnione od sposobu oddziaływania tego brzegu na substancję rozproszoną (co wyrażamy poprzez warunki brzegowe). W praktyce za podstawowy typ granicy obszaru należy uznać brzeg sztywny, nieprzepuszczalny dla substancji rozpuszczonej, lub stanowiący izolację dla strumienia energii cieplnej. Możemy wtedy przyjmować szczególną postać warunku brzegowego Neumanna (4.276).

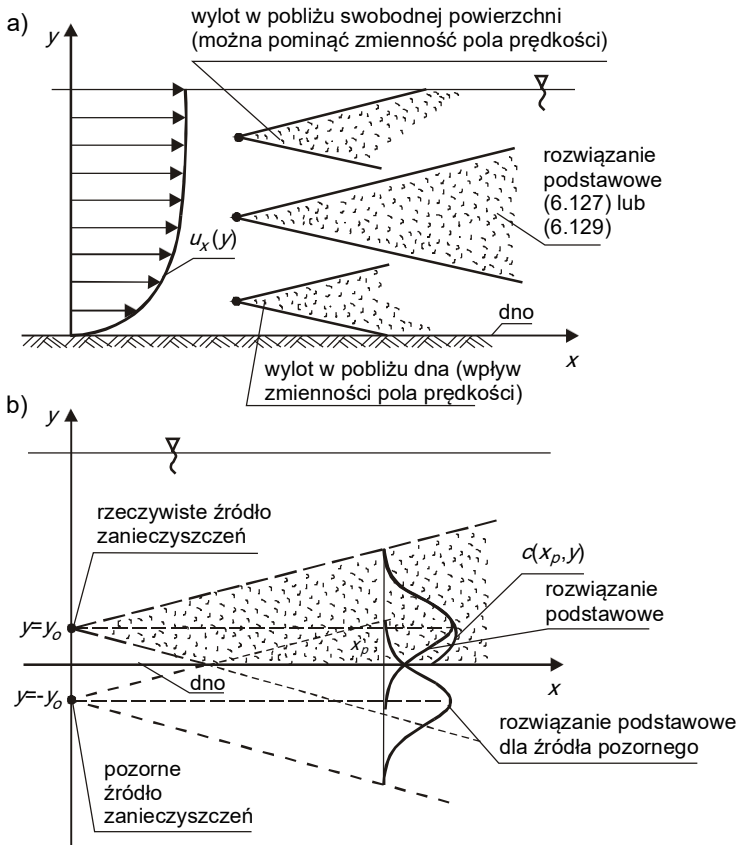
W ujęciu opisowym można rzec, iż warunek ten oznacza „odbicie” dyfuzyjnego strumienia masy (lub energii cieplnej) od ścianki sztywnej. Ta „odbita” masa (lub energia) pozostaje w układzie, powodując wzrost stężenia substancji rozproszonej oraz/lub temperatury w pobliżu ścianki.

Wzrost ten można opisać dokładnie, rozwiązując rozważane już równania w obszarze rzeczywistym. Praktycznie zawsze musimy tu stosować metody numeryczne. Jednakże w literaturze zagadnienia można dla takiej sytuacji znaleźć pewną metodę analityczną, zwaną „*metodą odbić zwierciadlanych*”. Jej zasada przedstawiona jest na rys. 6.11b. Polega ona na wprowadzeniu pewnej liczby N nierzeczywistych, pozornych źródeł substancji zanieczyszczającej, o tej samej intensywności, co źródło rzeczywiste dla przypadku emisji wzdłuż linii o długości b , jak w równaniu (6.127). Te dodatkowe źródła usytuowane są w odległościach $(2nh \pm y \pm y_0)$, $n = 1, 2, \dots, N$, od początku układu współrzędnych (symbole h i y_0 zaznaczone są na rys. 6.11b). Rozwiązanie opisujące stężenie w pobliżu brzegu opisane jest wtedy zależnością

$$c(x, y) = C(x, y \pm y_0) + \sum_{n=1}^N C(x, 2nh \pm y \pm y_0), \quad (6.130)$$

gdzie C oznacza rozwiązanie dane relacją (6.127), nazwane tu *rozwiązaniem podstawowym*.

Zasadę sumowania dla dwóch takich źródeł ilustruje rys. 6.11b. W pobliżu źródła wystarczy przyjąć $N = 6$ [110]. Dla większych obszarów niezbędne jest przyjęcie większej liczby członów w rozwinięciu (6.130).



Rys. 6.11. Stosowanie uproszczonego modelu ustalonego transportu zanieczyszczeń (a – rozwiązania podstawowe, b – metoda odbić zwierciadlanych)

Dla emisji punktowej, jak w rozwiązaniu (6.129), źródła pozorne sytuujemy w odległościach $[(2nh \pm y \pm y_0), (2mb \pm z \pm z_0)]$, $n = 1, 2, \dots, N$, $m = 1, 2, \dots, M$, od położenia źródła rzeczywistego, a pole stężenia dane jest następującymi relacjami:

$$c(x, y, z) = \frac{m}{4\pi x \sqrt{D_{TH} D_{TV}}} Y_{PP}(x, y) Z_{PP}(x, y), \quad (6.131)$$

$$Y_{PP}(x, y) = Y_p(x, y \pm y_0) + \sum_{n=1}^N Y_p(x, 2nh \pm y \pm y_0), \quad (6.132)$$

$$Z_{PP}(x, z) = Z_p(x, z \pm z_0) + \sum_{m=1}^M Z_p(x, 2mb \pm z \pm z_0), \quad (6.133)$$

gdzie zgodnie z rozwiązaniem podstawowym (6.129)

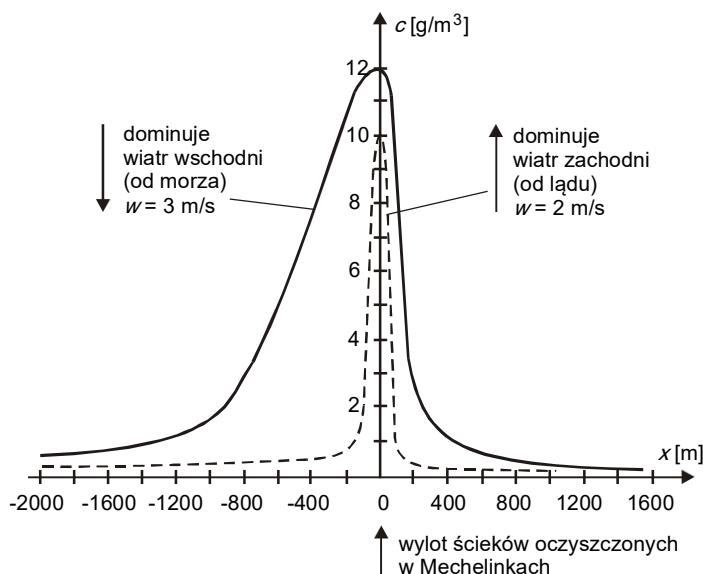
$$Y_P(x, y) = \exp\left(-\frac{u_x(y - y_0)^2}{4D_{TH}x}\right), \quad (6.134)$$

$$Z_P(x, y) = \exp\left(-\frac{u_x(z - z_0)^2}{4D_{TV}x}\right). \quad (6.135)$$

W wyżej opisany sposób możemy więc otrzymać przybliżone rozwiązanie w obszarze ograniczonym, wykorzystując przybliżone rozwiązania podstawowe dla obszaru nieograniczonego.

Bardzo istotnym elementem jest tu drugi z wymienionych na początku tego punktu warunków – stałość prędkości adwekcji. Założenie to niekiedy można z akceptowalną dokładnością przyjmować w rejonie swobodnej powierzchni (lecz wtedy, gdy nie ma istotnego oddziaływania wiatru, lub innych czynników, różnicujących prędkość w tym obszarze). Jednakże w pobliżu sztywnego dna lub sztywnego brzegu strumienia cieczy, poprzeczna zmienność wektora prędkości jest na tyle duża, że metoda odbić zwierciadlanych może stać się nieprzydatna.

Rozbieżności między wynikami obliczeń, wykonywanych metodami uproszczonymi, a rzeczywistym przebiegiem procesu mieszania będą szczególnie duże wtedy, gdy stopień złożoności pola prędkości jest wysoki. W praktyce często mamy do czynienia z odbiornikami, których prędkość jest generowana przez wiatr (morza, zatoki, jeziora). Pole prędkości adwekcji może wtedy ulegać bardzo znacznym zmianom, które w zasadniczy sposób różnicuje rozkład stężenia substancji rozpuszczonej.



Rys. 6.12. Przykładowy wpływ kierunku wiatru na stężenie zanieczyszczeń w strefie brzegowej odbiornika (wylot ścieków w Mechelinkach k/Gdyni [115])

Jak widać na przykładzie (rys. 6.12), stężenie zanieczyszczeń wzdłuż brzegu jest znaczne gdy wieje wiatr od strony morza (który utrudnia mieszanie i powoduje stagnację wody zanieczyszczonej w pobliżu brzegu). Dla wiatru wiejącego od strony lądu warunki mieszania są lepsze i stężenie zanieczyszczeń w strefie przybrzeżnej spada.

6.5.2.5. Metody numeryczne. W związku z omówionym już w punkcie 6.5.2.2 wpływem zmienności współczynników burzliwego transportu na możliwość analitycznego rozwiązywania równań migracji zanieczyszczeń, metody numerycznego ich rozwiązywania nabierają zasadniczego znaczenia. To one właśnie stanowią główne narzędzie pracy specjalistów, zainteresowanych symulacjami procesów rozprzestrzeniania się masy i energii w płynach. Raz jeszcze trzeba tu podkreślić (patrz par. 4.12.4), że w praktyce do obliczeń z reguły wykorzystuje się gotowe programy dla maszyn liczących, bardzo często mające charakter komercyjny. W związku z tym głównymi zadaniami osoby podejmującej dane zagadnienie staje się właściwy opis jego cech jednostkowych (kształtu obszaru i jego własności, warunków początkowych i brzegowych).

6.5.2.6. Wpływ efektów numerycznych na rozwiązanie równania migracji zanieczyszczeń. Metody numeryczne, praktycznie podstawowe narzędzie rozwiązywania równań fizyki matematycznej, mają z definicji charakter przybliżony. Tym samym uzyskane dzięki nim informacje zawsze obarczone są pewnymi błędami. Kwestiom szacowania wielkości tych błędów oraz metodom ich minimalizacji poświęcona jest bardzo obszerna literatura. Jej znajomość jest niezbędna dla specjalistów, zorientowanych na stosowanie tego narzędzia.

Jak już wcześniej zaznaczono, jeśli osoba zainteresowana problemami migracji zanieczyszczeń pragnie samodzielnie tworzyć algorytmy numerycznego rozwiązywania takich problemów, to musi sięgnąć do odrębnych pozycji bibliografii (np. [15, 43, 66, 157]). Z tego względu tematyka ta nie jest tutaj omawiana.

Jednakże pewne aspekty tego problemu mają zasadnicze znaczenie także dla osób, które korzystają z komercyjnych algorytmów obliczeniowych. Pierwszy z tych aspektów, o charakterze generalnym, sprowadzić można do wymogu określenia efektywnej dokładności stosowanej metody numerycznej. Słowo „efektywny” oznacza tu dokładność całkowitą, ujmującą wszystkie czynniki, począwszy od wyboru schematów różnicowych, aż po błędy spowodowane zaokrągleniami przy wykonywaniu poszczególnych działań algebraicznych.

Nie jest to zadanie proste, gdyż oszacowanie błędu z reguły zależy od indywidualnych warunków, a problem nie jest do końca zbadany. W literaturze znaleźć można przykłady takich zagadnień, gdy wpływ efektów numerycznych jest tego samego rzędu, co oddziaływanie czynników fizycznych. Użytkownik gotowych algorytmów obliczeniowych jest więc zobowiązany do bardzo starannej lektury instrukcji producenta tego algorytmu, a w razie pojawienia się wątpliwości – do ich rozwiania (kontakt z producentem, konsultacje ze specjalistą, oszacowanie dokładności metodą prób i błędów).

Drugi aspekt, który warto tu zaprezentować, ma z kolei charakter bardzo szczegółowy i odnosi się do pojęcia *dyfuzji numerycznej*. Przedstawimy go dla przypadku jednowymiarowego. Punktem wyjścia niech będzie równanie (4.297). Jeżeli dla schematu różnicowego jak na rys. 4.47a, pochodną względem czasu przybliżymy ilorazem różnicowym (4.351), zaś dla pochodnej względem zmiennej x napiszemy, że

$$\frac{\partial s_p}{\partial x} \approx \frac{s_{p,i,j} - s_{p,i,j-1}}{\Delta x}, \quad (6.136)$$

to zamiast (4.297) otrzymamy następujące równanie różnicowe:

$$\frac{s_{p,i+1,j} - s_{p,i,j}}{\Delta t} + v \frac{s_{p,i,j} - s_{p,i,j-1}}{\Delta x} = 0. \quad (6.137)$$

Wyraźmy teraz wartości szukanej funkcji w węzłach $(i+1, j)$ oraz $(i, j+1)$ poprzez szereg Taylora funkcji s_p w węzle (i, j) . Ograniczając się do członów z drugimi pochodnymi, mamy

$$s_{p,i,j-1} = s_{p,i,j} - \Delta x \frac{\partial s_p}{\partial x} + \frac{1}{2} \Delta x^2 \frac{\partial^2 s_p}{\partial x^2} + \dots, \quad (6.138)$$

$$s_{p,i+1,j} = s_{p,i,j} + \Delta t \frac{\partial s_p}{\partial t} + \frac{1}{2} \Delta t^2 \frac{\partial^2 s_p}{\partial t^2} + \dots. \quad (6.139)$$

Zauważmy, że różniczkując (4.297) względem czasu t oraz zmiennej x , otrzymamy zależność

$$\frac{\partial^2 s_p}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 s_p}{\partial x^2}, \quad (6.140)$$

która umożliwi zastąpienie drugiej pochodnej względem czasu w (6.139) przez drugą pochodną względem x . Wstawiając trzy ostatnie wyrażenia do (6.137) i wykonując proste przekształcenia, piszemy

$$\frac{\partial s_p}{\partial t} + v \frac{\partial s_p}{\partial x} = \frac{v\Delta x - v^2\Delta t}{2} \frac{\partial^2 s_p}{\partial x^2}. \quad (6.141)$$

Pokazaliśmy w ten sposób, że przyjęty tu schemat numerycznej aproksymacji pochodnych w równaniu wyjściowym generuje w nim pewien dodatkowy człon, mający postać typowego członu dyfuzyjnego. Z tego względu

$$D_n = \frac{v\Delta x - v^2\Delta t}{2} \quad (6.142)$$

nazywamy *współczynnikiem dyfuzji numerycznej*, a omówiony wyżej efekt – *dyfuzją numeryczną*.

Jeżeli teraz zamiast równania adwekcji (4.297) rozważymy równanie adwekcji-dyfuzji (4.335), to możemy napisać, że

$$\frac{\partial s_p}{\partial t} + v \frac{\partial s_p}{\partial x} = (D_s + D_n) \frac{\partial^2 s_p}{\partial x^2}. \quad (6.143)$$

Widać teraz wyraźnie, że efekty numeryczne mogą w istotny sposób wpływać na intensywność dyfuzji obserwowanej w rozwiązaniu. Dla uniknięcia tego czynnika należy minimalizować wpływ dyfuzji numerycznej. Zgodnie z (6.143) powinno być $D_n = 0$, co wobec (6.142) wymaga spełnienia warunku

$$Cr_a = \frac{v\Delta t}{\Delta x} = 1. \quad (6.144)$$

Symbol Cr_a oznacza *adwekcyjną liczbę Couranta* (patrz też (4.354)).

Gdy warunek ten nie jest możliwy do spełnienia (ze względu na wymiary siatki obliczeniowej oraz inne wymogi stosowanej metody [15, 157]), możemy odpowiednio korygować współczynnik transportu, wstawiając do równania wyjściowego

$$D_{ef} = D_S - D_n, \quad (6.145)$$

aby jego wartość obliczeniowa była równa wartości fizycznej.

Dodajmy jeszcze, że uwagi powyższe odnoszą się także do dyfuzji molekularnej.

Przykład 6.1

Wyznaczyć rozkład sumarycznego stężenia nierozkładalnych związków gazowych, wchodzących w skład dymu, emitowanego z komina o wysokości $H = 50,0$ m. Wylotowe stężenie zanieczyszczeń wynosi $c_o = 500$ g/m³, co przy objętościowym natężeniu emisji $Q = 0,10$ m³/s oznacza intensywność emisji $m_Z = 50,0$ g/s. Obliczeniowa prędkość wiatru może być traktowana jako stała i równa $w = 3,0$ m/s.

Rozwiązanie

Ulokujmy początek układu współrzędnych u wylotu komina, kierując oś $0x$ wzdłuż kierunku ruchu powietrza, zaś oś $0z$ – pionowo w górę (rys. 6.13). Ze względu na warunki zadania, zakładając dodatkowo izotropię procesu, możemy dla rozważanego przypadku następująco przepisać równanie transportu (6.112):

$$w \frac{\partial c}{\partial x} = D_T \Delta c.$$

Współczynnik dyfuzji turbulentnej D_T obliczymy ze wzoru (6.84), korzystając też z zależności (6.49), (6.74), (6.75), (6.77) i (6.79). Przyjmując, że intensywność turbulencji $\|w'\|/w = 0,1$, otrzymano

$$D_T = 0,16 \text{ m}^2/\text{s}.$$

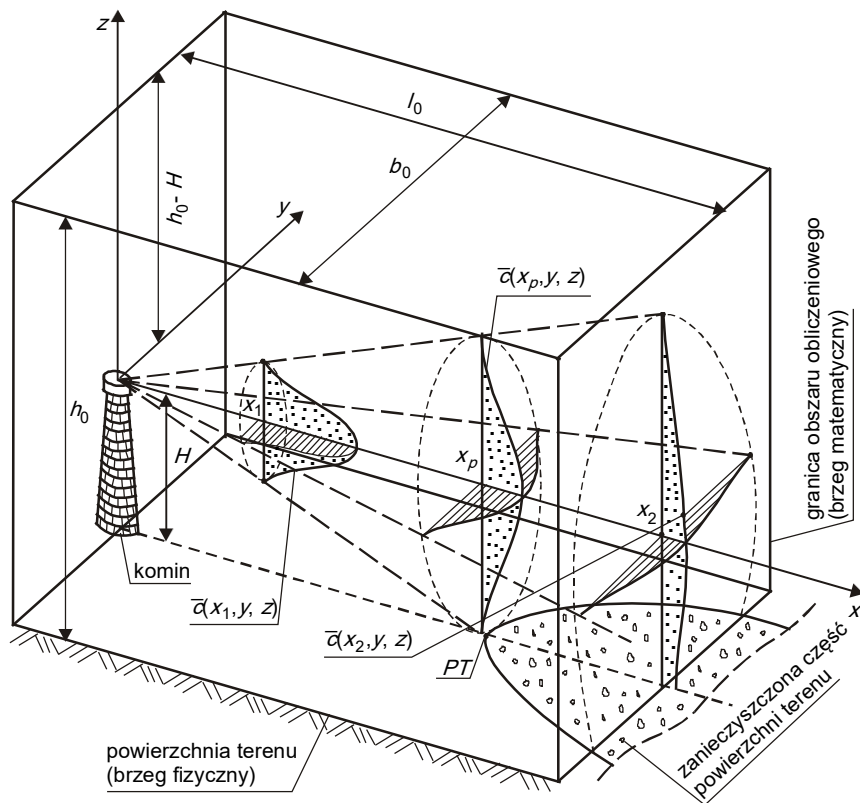
Ze względu na charakter odbiornika, w którym rozważamy migrację zanieczyszczeń, musimy zdefiniować obszar, w którym określone jest rozwiązanie za pomocą granic matematycznych, gdyż jedynym naturalnym ograniczeniem jest tu powierzchnia terenu. Przyjęto więc, że kształt obszaru wyznacza prostopadłościan o wymiarach (l_o, h_o, b_o) , jak na rys. 6.13 (w skali skażonej, dla zapewnienia czytelności schematu).

Wymiary te należy tak ustalić, aby ułatwiały sformułowanie warunków brzegowych, czyli aby brzeg matematyczny był w jak najmniejszym stopniu przecinany przez strumień zanieczyszczonego powietrza.

Generalnie zauważmy, że na odcinku od $x = 0$ do $x = x_p$ istnieje możliwość wykorzystania uproszczonego rozwiązania analitycznego (6.129). Dla $x > x_p$ moglibyśmy wtedy zastosować metodę odbić zwierciadlanych, prowadzącą do relacji (6.131). Wymaga to odrzucenia w równaniu transportu drugiej pochodnej względem zmiennej x , co musi być poprzedzone oszacowaniem spowodowanego tą decyzją błędu.

Jednakże, ze względu na przykładowy charakter niniejszych rozważań, sformułujmy zadanie w sposób typowy przy stosowaniu metod numerycznych. Natomiast wspomniane wyżej rozwiązanie przybliżone analityczne wykorzystajmy do określenia rozmiarów obszaru obliczeniowego. Jako wartość x_p przyjmijmy obliczoną z zależności (6.129) odciętą punktu PT, w którym strumień zanieczyszczonego powietrza o stężeniu $c_{PT} = 0,01$ $c(x_p, 0, 0)$ osiąga powierzchnię terenu ($x = x_p$, $y = 0$, $z = -H$). Po wykonaniu rachunków (dla $u_x = w$, $D_{TH} = D_{TV} = D_T$) otrzymujemy

$$x_p = 2650 \text{ m}.$$



Rys. 6.13. Emisja zanieczyszczeń gazowych z komina (przykład 6.1)

Od tego miejsca (dla $x > x_p$) strumień dymu staje się asymetryczny, gdyż jego dolna część styka się już bezpośrednio z powierzchnią Ziemi. Jeżeli przyjąć teraz $l_o = 4000$ m, $b_o = 160$ m oraz $h_o = 130$ m, to cały „stożek” zanieczyszczonego powietrza będzie mieścił się wewnątrz obliczeniowego prostopadłościanu.

W takim obszarze na ścianie początkowej ($x = 0$), górnej ($z = h_o - H$) oraz na obu ściankach bocznych ($y = b_o/2$ oraz $y = -b_o/2$) możemy zadać warunek Dirichleta

$$c_b = 0,$$

oczywiście z wyjątkiem samego wylotu komina o współrzędnych $(0, 0, 0)$, gdzie

$$c_b = c_o = 500 \text{ g/m}^3.$$

Dla ściany dolnej ($z = -H$) oraz końcowej ($x = l_o$) nie możemy przyjąć warunku Dirichleta, wobec tego założymy

$$\frac{\partial c}{\partial n} = \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ dla } z = -H,$$

$$\frac{\partial c}{\partial n} = \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \text{ dla } x = l_o.$$

Warunek ten jest dokładnie spełniony dla pierwszej z tych płaszczyzn (bo powierzchnia terenu jest nieprzepuszczalna dla dyfundującej substancji), ale ma on charakter warunku przybliżonego dla drugiej z nich.

Tak postawione zadanie rozwiązano metodą iteracji prostej, aproksymując równanie transportu za pomocą różnic skończonych [157]. Jako pierwsze przybliżenie przyjęto, że w całym obszarze poza osią $0x$ mamy $c^I = 0$, zaś dla tej osi założono liniową zmianę stężenia od 500 g/m^3 dla $x = 0$, do zera dla $x = l_o$.

Przykładowe profile stężenia, otrzymane w wyniku obliczeń, pokazano na rys. 6.13 (dla $x_1 = 1000 \text{ m}$, $x_p = 2650 \text{ m}$ oraz $x_2 = l_o = 4000 \text{ m}$). ■

Przykład 6.2

Oczyszczone ścieki odprowadzane są do wód morskich. Ich wylot wykonano w postaci długiego, perforowanego przewodu kołowego, ułożonego na dnie odbiornika, na głębokości $H = 20 \text{ m}$. Charakterystyczną dla tego akwenu prędkość wody można przyjąć równą $w = 0,1 \text{ m/s}$. Jest ona zorientowana prostopadłe do osi rurociągu. Opisać rozkład stężenia związków azotu w wodzie morskiej w otoczeniu wylotu, jeśli ich sumaryczne stężenie w odprowadzanych ściekach wynosi $c_o = 20 \text{ g N/m}^3$, a prędkość wylotowa ścieków jest równa $u_{wo} = 1,00 \text{ m/s}$.

Rozwiązanie

Podane wyżej warunki są na tyle regularne, że rozważany problem ma ewidentnie charakter szkolnego przykładu. Jednak mimo to pozwala on na uwypuklenie i przedyskutowanie typowych elementów, istotnych przy rozważaniu wpływu wylotu kanalizacyjnego na odbiornik.

Proces rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w rejonie wylotu ma z zasady charakter nieustalony. Rozmiary obszaru zanieczyszczonego wzrastają z czasem, w miarę dopływu ścieków. I nawet jeśli w miarę upływu czasu kształt tego obszaru mógłby wykazywać tendencję do stabilizacji (szczególnie dla substancji rozkładalnych, gdy przemiany źródłowe kompensują dopływ zanieczyszczeń), to praktycznie nieunikniona zmienność warunków dynamicznych (wiatr!) powoduje ciągłą ewolucję tego kształtu.

Jest zrozumiałe, że ze względu na losowy charakter prędkości wiatru, możliwość dokładnej matematycznej symulacji procesu migracji zanieczyszczeń w rozważanych tu warunkach jest problematyczna. W praktyce ograniczamy się więc do wykonywania obliczeń dla warunków uśrednionych, stanowiących pewne typowe schematyczne stany rozważanego procesu.

Przyjmijmy więc, że warunki podane w treści zadania opisują właśnie jeden z takich stanów schematycznych. Ze względu na kształt wylotu (prosty rurociąg) możemy zadanie traktować jako płaskie. Pomińmy też ewentualne przemiany źródłowe. Proces migracji opisany jest więc tutaj następującym równaniem:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_x \frac{\partial c}{\partial x} + v_z \frac{\partial c}{\partial z} = D_T \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right).$$

Kształt obszaru obliczeniowego pokazano na rys. 6.14. Jest on prostokątem, utworzonym przez swobodną powierzchnię cieczy i powierzchnię dna (granice fizyczne) oraz przez dwie pionowe linie $x = 0$ i $x = L$ (granice matematyczne).

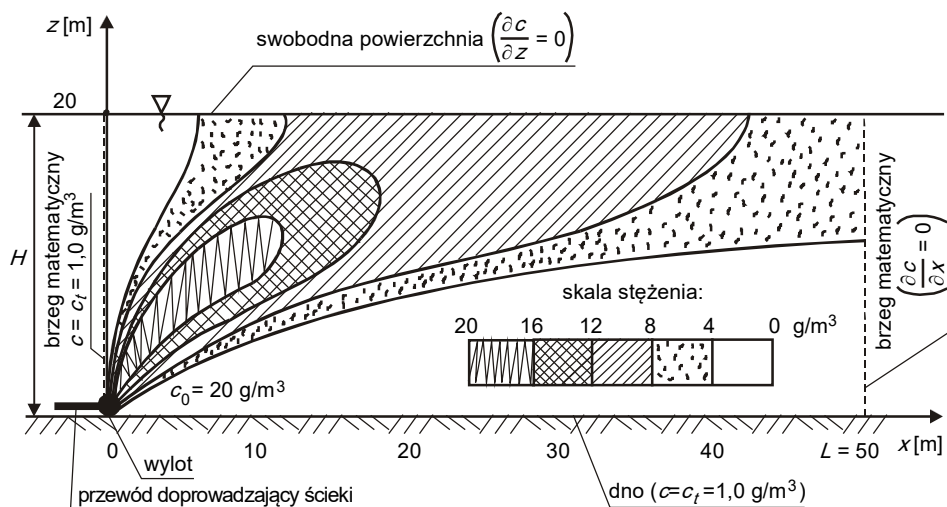
Ze względu na spodziewany przebieg zjawiska możemy dla linii $z = 0$ oraz $x = 0$ przyjąć warunek brzegowy Dirichleta

$$c(x = 0, z) = c(x, z = 0) = c_i = 1,0 \text{ g/m}^3,$$

oczywiście z wyjątkiem punktu ($x = 0, z = 0$), gdzie stężenie jest równe $20,0 \text{ g/m}^3$. Dla pozostałych części brzegu, ze względu na ich spodziewany kontakt z substancjami rozpuszczonymi, możemy przyjąć uproszczony warunek Neumanna, zgodnie z którym

$$\frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad \text{dla} \quad x = L, \quad \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad \text{dla} \quad z = H.$$

Rozważamy tu proces nieustalony, więc niezbędny jest też warunek początkowy. Przyjmijmy, że przed uruchomieniem wylotu stężenie związków azotu w wodzie odbiornika („tło”) było równe $c_t = 1,0 \text{ g N/m}^3$. Ta właśnie wartość określa warunek początkowy.

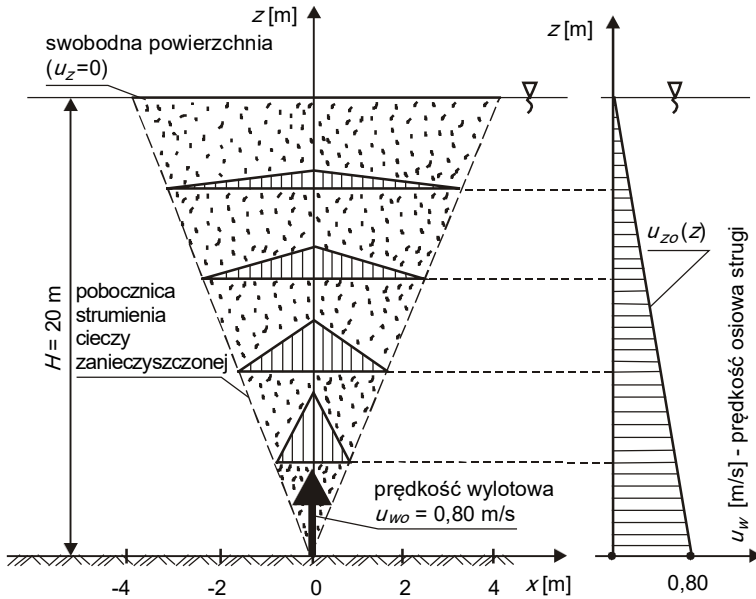


Rys. 6.14. Rozkład stężenia zanieczyszczeń w rejonie dennego wylotu ścieków (przykład 6.2)

Zasadnicze znaczenie przy rozwiązywaniu rozważanego zadania ma określenie pola prędkości płynu. Jak już wiemy (rozdz. 4), w dokładnym ujęciu pole to (wraz z rozkładem ciśnienia) opisane jest równaniem zachowania masy i pędu, sprzężonymi z równaniami transportu. Rozwiązanie takiej pełnej wersji modelu jest bardzo obszernym i trudnym zadaniem, a pamiętamy, że wzrost stopnia formalnej złożoności zadania nie zawsze jest równoznaczny ze wzrostem stopnia dokładności opisu problemu. W szczególności przejawia się to w warunkach ruchu burzliwego, gdy współczynniki turbulენტnej lepkości i turbulენტnej dyfuzji opisywane są metodami bazującymi na teoriach przybliżonych. Z tego względu formułowanie zagadnienia na poziomie technicznym musi być związane z pewnym kompromisem między wariantem opisu teoretycznego a realiami obliczeniowymi.

Do naszych potrzeb wykorzystajmy podejście przybliżone, co pozwoli nam zademonstrować praktycznie stosowane metody i uproszczenia. Przyjmijmy mianowicie, że pole prędkości wody w rejonie wylotu jest określone przez wektorową sumę średniej prędkości poziomego prądu wody ($u_x = w = 0,1 \text{ m/s}$) oraz składowej pionowej, generowanej przez wypływające z wylotu ścieki. Uwzględniając charakterystyczne cechy zatopionych strumieni płynu (np. [45, 169]), jak również tłumiące pionowy przepływ działanie powierzchni cieczy, możemy przyjąć, że pionowa składowa prędkości w osi strumienia maleje liniowo od wartości maksymalnej w punkcie wylotu ($z = 0$), do zera na swobodnej powierzchni ($z = H$).

Kąt rozszerzenia strumienia wynosi 22° , wobec czego na powierzchni ma on szerokość 8,00 m. Przyjmijmy też, że w obrębie strumienia jego prędkość maleje liniowo od wartości maksymalnej w osi, do zera na pobocznicy. Obraz pola prędkości przy wyżej omówionych założeniach pokazano na rys. 6.15, dla ośrodka nieruchomego ($w = 0$). Gdy w jest różne od zera, oś takiego strumienia będzie oczywiście wygięta w kierunku ruchu cieczy, proporcjonalnie do modułu prędkości poziomej.



Rys. 6.15. Uproszczony model pola prędkości w pionowym strumieniu zatopionym (przykład 6.2)

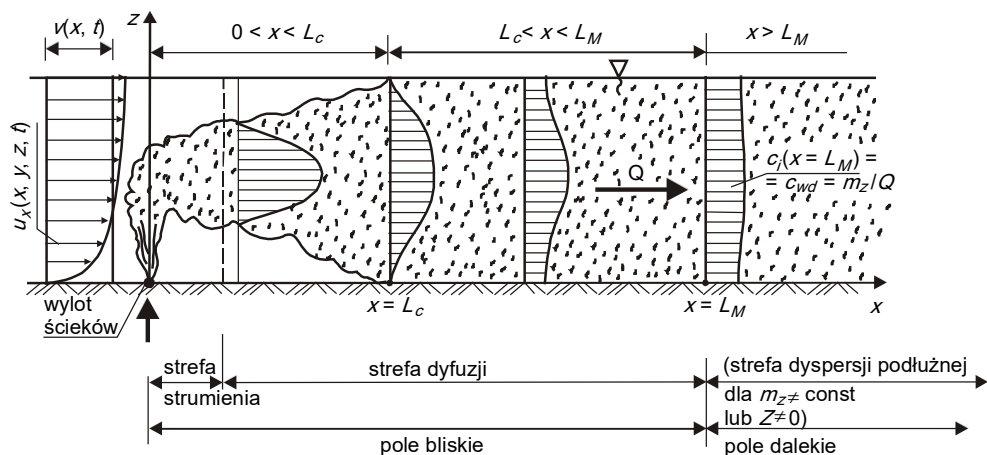
Tak postawione zadanie rozwiązano numerycznie metodą różnic skończonych, dla współczynnika dyfuzji $D_T = 0,0008$ m²/s (według wzoru (6.72), przy prędkości dynamicznej wg (6.66) równej $v^* = 0,0003$ m/s). Przykładowy obraz izolinii stężenia po czasie $t = 24$ godziny pokazano na rys. 6.14. ■

6.5.3. Strefy mieszania zanieczyszczeń

Szczegółowy opis procesu mieszania strumienia płynu zanieczyszczonego z płynem (najczęściej wodą lub powietrzem) wypełniającym odbiornik ma zawsze charakter indywidualny. Choć bowiem ogólne równania migracji zanieczyszczeń są zawsze takie same, to możliwe konfiguracje i własności konkretnych układów, ich stany początkowe oraz warunki emisji zanieczyszczeń i oddziaływanie otoczenia bardzo mocno różnicują przebieg zjawiska. Jednakże mimo to możliwe jest wyróżnienie w tych jednostkowych rozkładach stężeń oraz/lub temperatury pewnych typowych elementów, czy stref.

Pierwszy z nich wiąże się z początkową prędkością wprowadzanego do odbiornika strumienia zanieczyszczeń u_{w0} . Gdy różni się ona znacznie od prędkości płynu otaczającego, wtedy kształt obszaru zanieczyszczonego w rejonie wylotu jest uzależniony od dynamiki strumienia. Tę część obszaru nazywamy *strefą strumienia* (rys. 6.16). Odtworzenie tej strefy

wymaga wyznaczenia rzeczywistego pola prędkości płynu (będącego superpozycją prędkości w samym odbiorniku oraz prędkości dopływających ścieków). Niekiedy strefa strumienia w istotny sposób wpływa na postać pola zanieczyszczeń. Widać to wyraźnie w przykładach 6.1 oraz 6.2. W ramach pierwszego z nich pominęliśmy pionową prędkość wypływu smugi dymu z komina, skutkiem czego substancje rozproszone od samego początku przemieszczają się tylko poziomo, zgodnie z kierunkiem wiatru (rys. 6.13). Inaczej postąpiliśmy w drugim z tych przykładów, gdzie uwzględniliśmy początkową energię strumienia ścieków (rys. 6.14).



Rys. 6.16. Strefy mieszania strumienia zanieczyszczeń

Opis pola prędkości w strefie strumienia może być dokładny (poprzez rozwiązanie równań ruchu płynu), albo przybliżony (gdy przyjmujemy pewne uproszczone „szablony” pól prędkości, jak np. na rys. 6.15). Zawsze jednak jest to dodatkowy element zadania, utrudniający opis migracji zanieczyszczeń.

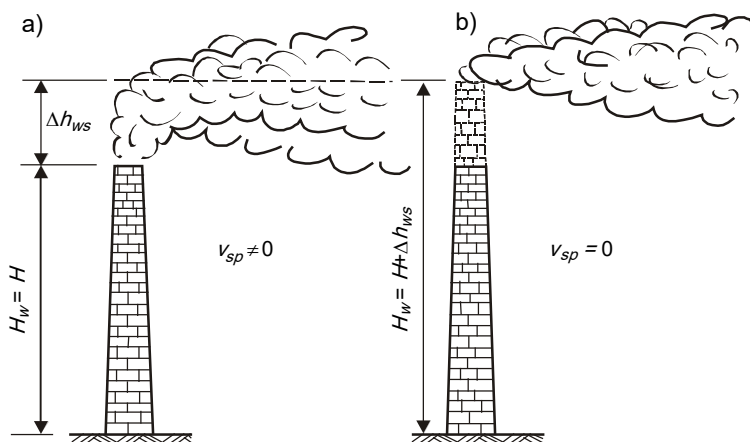
W przypadku pionowej orientacji strumienia zanieczyszczeń, kompromisowym rozwiązaniem, stosowanym przy modelowaniu emisji dymu i spalin do atmosfery ziemskiej, jest wprowadzenie pojęcia *wysokości wyniesienia* Δh_{ws} . Jest to pionowy dystans, który przebywają spaliny od wylotu z komina, do momentu utraty swej dynamicznej odrębności. Można tę wartość obliczyć ze wzoru *Hollanda*, zgodnie z którym

$$\Delta h_{ws} = (1,5 v_{sp} d_k + 0,041 \Delta T_{sp} Q_{sp} C_{wsp}) / w, \quad (6.146)$$

gdzie: v_{sp} – prędkość wylotu spalin, d_k – wewnętrzna średnica wylotu, ΔT_{sp} – różnica między temperaturami spalin i powietrza, Q_{sp} – wydatek spalin, C_{wsp} – ciepło właściwe spalin (można przyjmować $C_{wsp} = 0,325$ kcal/mK), w – prędkość wiatru.

Istotę tego pojęcia wyjaśnia szkic na rys. 6.17. Mamy mianowicie dwie możliwości: albo uwzględniamy tu strefę strumienia ($v_{sp} \neq 0$), sytuując wylot spalin na rzeczywistej wysokości komina $H_w = H$ i wyznaczamy rzeczywisty kształt smugi dymu (rys. 6.17a), albo też pomijamy prędkość początkową spalin, a w zamian sztucznie wydłużamy komin, umieszczając obliczeniowy wylot na wysokości $H_w = H + \Delta h_{ws}$ (rys. 6.17b). Układy smugi

dymu w pobliżu komina są dla obu przypadków inne, lecz na długim dystansie stają się podobne, co uzasadnia stosowanie wyżej omówionego uproszczenia.



Rys. 6.17. Interpretacja pojęcia „wysokość wyniesienia” wg (6.146)

Niezależnie od tego, czy w rozważanym przypadku występuje strefa strumienia, czy też nie występuje, rozmiary emitowanej smugi płynu zanieczyszczonego są z reguły mniejsze od charakterystycznych rozmiarów odbiornika. W wyniku procesów migracji masy oraz/lub energii (a więc adwekcji i dyfuzji) rozmiary obszaru zanieczyszczonego rosną. Mówimy tu o *strefie dyfuzji* (rys. 6.16). W praktyce jest to z reguły strefa dyfuzji burzliwej (*strefa mieszania turbulენტnego*). Przypomnijmy (patrz par. 6.2.2), że istnieje dolne ograniczenie stosowanego modelu dyfuzji. Mówi ono, że proces ten może być opisany liniowym prawem Ficka dopiero po upływie pewnego czasu od momentu wprowadzenia substancji rozpuszczonej do strumienia. Jest on określony przez *skalę czasową Lagrange’a* (6.46).

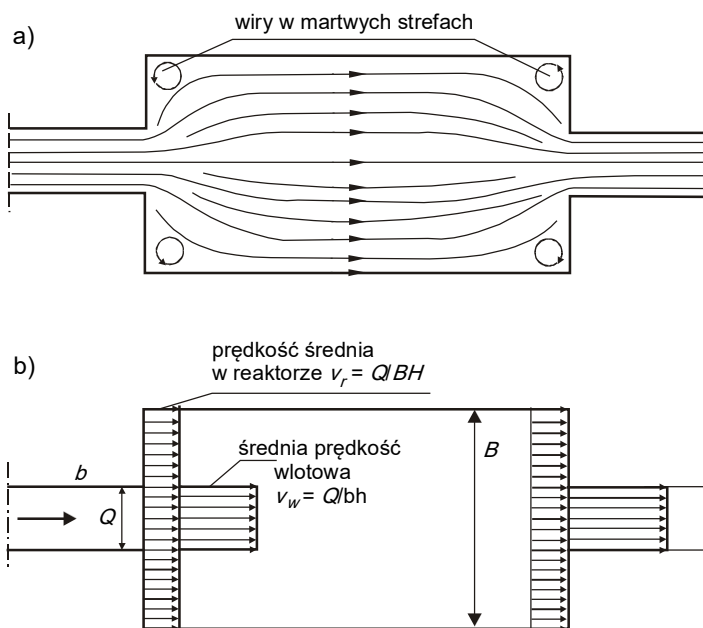
Jeżeli rozmiary odbiornika są bardzo znaczne, to spowodowany mieszaniami spadek stężenia zanieczyszczeń może być na tyle duży, że w praktyce możemy to stężenie w końcu traktować jako równe zero. Jest to możliwe szczególnie wtedy, gdy migrujące substancje ulegają jednoczesnemu rozpadowi wskutek działania procesów źródłowych (*samooczyszczanie odbiornika*). W takim przypadku odbiornik można traktować jako obszar nieograniczony (lub częściowo ograniczony, na przykład powierzchnią terenu w przypadku atmosfery ziemskiej – rys. 6.17).

Jednakże częściej mamy do czynienia z odbiornikami przynajmniej o ograniczonej głębokości (zbiorniki wodne), lub także ograniczonej szerokości (cieki wodne). Strumień cieczy zanieczyszczonej zbliża się wtedy do brzegów obszaru, aż w pewnym momencie, na *dystansie przecięcia brzegu* L_C (ang.: *crossing distance*), strumień zanieczyszczony „dotyka” brzegu obszaru (rys. 6.16). Podkreślmy, że choć od tego miejsca cały wymiar poprzeczny odbiornika wypełniony jest cieczą zanieczyszczoneą, to rozkład stężenia jest wciąż zróżnicowany. Jednakże wskutek mieszania ulega ono dalszemu wyrównaniu, aż na *dystansie pełnego mieszania* L_M osiąga wartość stałą (dokładnie, lub w dopuszczalnym przybliżeniu) w przekroju poprzecznym strumienia. Przekrój $x = L_M$ wyznacza koniec *strefy dyfuzji*, która wraz ze *strefą strumienia* tworzy *pole bliskie* (ang.: *near field*). Od tego przekroju rozciąga się *pole dalekie* (ang.: *far field*), zwane niekiedy *strefą dyspersji* (patrz rozdz. 7).

Podkreślmy, że wyżej wymienione strefy nie muszą zawsze występować jednocześnie. Niekiedy można napotkać takie ukształtowanie wylotów i takie warunki w odbiornikach, że powstają tylko niektóre z nich. Ale nawet jeśli w odbiorniku formują się wszystkie trzy kategorie stref mieszania, decyzję o ich opisie (lub pominięciu) należy każdorazowo podjąć po porównaniu ich rozmiarów z rozmiarami interesującego nas obszaru. Gdy więc rozważamy ekologiczne konsekwencje zrzutu ścieków, z reguły zasięg ich wpływu na odbiornik będzie na tyle znaczny, że pozwoli nam na pominięcie pola bliskiego. Możemy wtedy obliczyć początkowe stężenie zanieczyszczeń dla strefy dyspersji z bilansowego wzoru (4.260). Wzór ten można też przepisać następująco (rys.6.16):

$$c_{wdi} = m_{zi}/Q . \quad (6.147)$$

Z zupełnie przeciwnymi sytuacjami można mieć do czynienia w obiektach technicznych, głównie w *reaktorach do oczyszczania wody i ścieków* [122]. Ich długość jest z reguły mniejsza niż długość pola bliskiego. Tym samym nawet względnie dokładne wyznaczenie pola prędkości w takim reaktorze (rys. 6.18a) jest kłopotliwe. W praktyce przyjmuje się więc powszechnie (np. [173]), że reaktor leży w obrębie pola dalekiego (rys. 6.18b). Jest to jednak bardzo daleko idące uproszczenie, negatywnie wpływające na poziom projektowania takich obiektów.



Rys. 6.18. Schematy przepływe dla reaktorów prostopadłościennych (a – rzeczywisty układ linii prądu, b – stosowane uproszczenie projektowe)

Dokładne wyznaczenie długości pola bliskiego w ogólnym przypadku jest rzeczą skomplikowaną. Jednakże do potrzeb praktycznych z reguły wykorzystuje się pewne oszacowania. Otrzymuje się je dla układów o regularnej geometrii (stała szerokość b oraz głębokość h), lecz bywają one stosowane także dla wielu układów naturalnych (lecz o mało zmiennych wartościach b i h).

Punktem wyjścia dla uzyskania tych oszacowań jest wyznaczenie czasu t_{pd} dyfuzyjnego przemieszczania się substancji rozpuszczonej na dystansie L_{pd} . Przy stałej prędkości tego przemieszczania v_{pd} , czas ten jest równy

$$t_{pd} = L_{pd}/v_{pd} . \quad (6.148)$$

Wielkość v_{pd} możemy określić na podstawie (4.198). Dla warunków ruchu turbulentnego w kierunku osi $0z$ mamy wtedy

$$|v_{pd}| = \frac{D_T}{C} \frac{\partial c}{\partial z} . \quad (6.149)$$

W rozważanym przypadku substancja rozpuszczona o stężeniu c_{\max} znajduje się w pobliżu jednego z brzegów warstwy cieczy. Drugi jej brzeg nie kontaktuje się jeszcze z tą substancją. Możemy wtedy przyjąć następujące oszacowanie (rys. 6.19):

$$\frac{\partial c}{\partial z} \approx \frac{c_{\max}}{L_{pd}}, \quad c = c_{\max} . \quad (6.150)$$

Podstawiając te relacje do (6.149) mamy

$$|v_{pd}| \approx \frac{D_T}{L_{pd}} , \quad (6.151)$$

co zgodnie z (6.148) pozwala określić czas t_{pd} , po którym substancja rozpuszczona przebędzie dystans L_{pd} , wzorem

$$t_{pd} \approx L_{pd}^2/D_T . \quad (6.152)$$

Jeżeli ciecz płynie wzdłuż kierunku $0x$ z prędkością średnią v_x , to w czasie tym przebędzie dystans

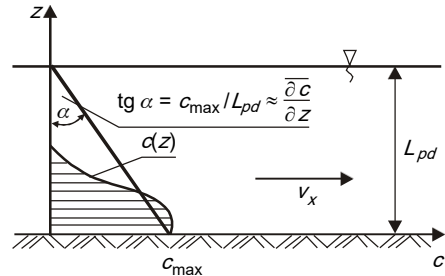
$$L_M \approx \frac{v_x L_{pd}^2}{D_T} . \quad (6.153)$$

Rozważmy teraz mieszanie turbulentne w kierunku pionowym. Długość pola bliskiego będzie oczywiście uzależniona od usytuowania wylotu ścieków w warstwie płynu w odborniku, toteż zajmiemy się tylko położeniami skrajnymi: gdy wylot usytuowany jest najdalej od granicy warstwy, czyli w połowie głębokości h (wtedy ogólny wzór (6.153) pozwoli wyznaczyć dystans L_{MVC}) oraz gdy wylot usytuowany jest na granicy warstwy, czyli na dnie lub na swobodnej powierzchni (co daje wartość L_{MVP}). Wykorzystując dane empiryczne i przyjmując, że mieszanie uważamy za zakończone wtedy, gdy *stopień mieszania*

$$P_m = c_{\min}/c_{\max} \quad (6.154)$$

wynosi $P_m = 0,98$ (czyli gdy koncentracja na brzegu warstwy różni się o 2% od jej wartości maksymalnej), mamy [37, 110] (rys. 6.20a)

$$L_{MVC} = 0,134 \frac{v_x h^2}{D_{TV}} . \quad (6.155)$$

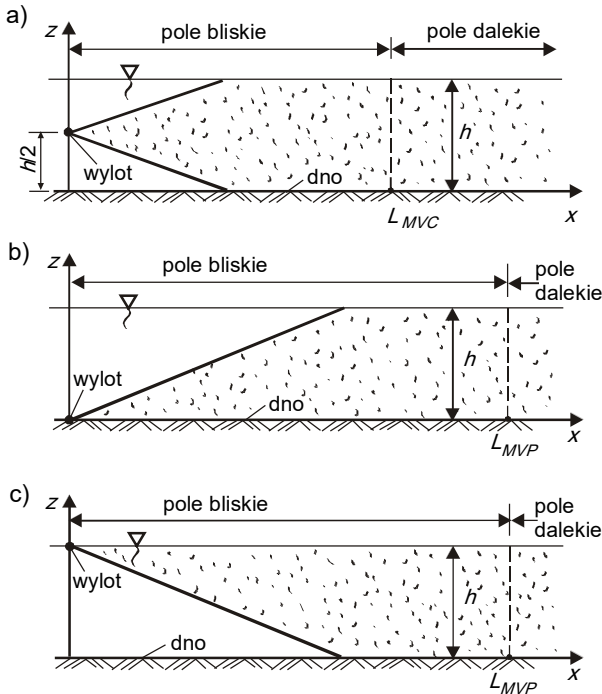


Rys. 6.19. Praktyczne oszacowanie pionowego gradientu stężenia

Gdy punktowy wylot ścieków umieszczony jest na dnie lub na swobodnej powierzchni (rys. 6.20b, c), wtedy oszacowanie (6.153), uzupełnione danymi empirycznymi, daje

$$L_{MVP} = 0,536 \frac{v_x h^2}{D_{TV}}. \quad (6.156)$$

Jak widać, długość strefy mieszania pionowego dla wylotu centralnego jest czterokrotnie mniejsza niż przy wylotach na brzegu warstwy, przy czym symetria powyższych schematów występuje przy założeniu stałej prędkości w pionie. W rzeczywistości jednak typowa tachoida $v_x(z)$ dąży na dnie do zera, skutkiem czego minimalny dystans mieszania występuje dla wylotu usytuowanego nieco powyżej środka warstwy cieczy.



Rys. 6.20. Długość strefy mieszania pionowego (a – wylot centralny, b – wylot denny, c – wylot powierzchniowy)

Podstawiając do poprzednich relacji wartość współczynnika dyfuzji burzliwej według wzoru (6.67), mamy

$$\frac{L_{MVC}}{h} = 2 \frac{v_x}{v^*}, \quad \frac{L_{MVP}}{h} = 8 \frac{v_x}{v^*}. \quad (6.157)$$

Obserwacje wykazują, że w rzekach prędkość dynamiczna v^* rzadko kiedy przekracza poziom kilku procent prędkości średniej v_x , toteż mamy $v_x/v^* \approx 25$. Pozwala to uzyskać następujące oszacowanie:

$$L_{MVC} \approx 50 h, \quad L_{MVP} \approx 200 h. \quad (6.158)$$

Są one przybliżone, lecz bardzo przydatne w praktyce technicznej.

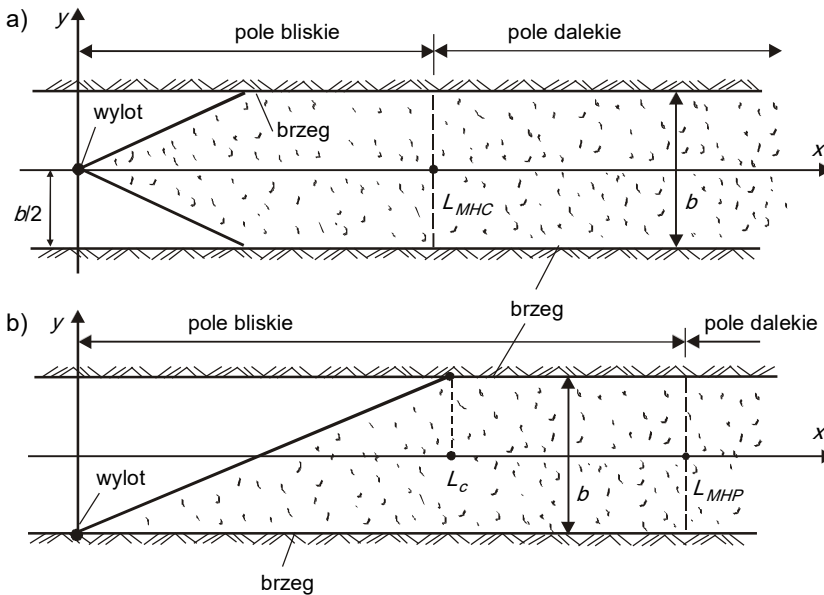
W dotychczasowych rozważaniach tego paragrafu nie braliśmy pod uwagę ewentualnego wpływu na proces mieszania różnicy gęstości ścieków ρ_s i płynu ρ_p w odbiorniku. Innymi słowy, powyższe wzory są ważne dla jednakowej gęstości obu płynów. Bardzo często warunek ten możemy zaakceptować, lecz niekiedy wpływ różnicy gęstości ma duże znaczenie. Typowym przykładem może tu być zrzut wód chłodniczych do odbiornika.

Miarą tego wpływu jest gęstościowa liczba Froude'a

$$Fr_g = \frac{v_x}{\sqrt{gh \frac{\rho_c - \rho_s}{\rho_c}}}, \quad (6.159)$$

będąca w zasadzie pierwiastkiem z odwrotności liczby Richardsona (6.70). Otóż okazuje się, że gdy $Fr_g < 1$, mamy do czynienia ze stratyfikacją obu płynów (zrzucone ścieki tworzą warstwę praktycznie odrębną, która bardzo powoli ulega mieszaniu z otoczeniem). Z kolei gdy $Fr_g > 15$, wtedy praktycznie można pominąć różnicę gęstości i stosować wzory (6.157). W zakresie pośrednim [110, 141] można stosować wzór

$$L_{MV}^g(\Delta\rho)/L_{MV} = 27 Fr_g^{0,7}. \quad (6.160)$$



Rys. 6.21. Długość strefy mieszania poziomego (a – wylot centralny, b – wylot brzegowy)

Przejdźmy teraz do kwestii mieszania turbulentnego w kierunku poziomym, wzdłuż szerokości strumienia b . Wykorzystując dotychczasowe informacje możemy napisać (rys. 6.21), że

$$L_{MHC} = 0,134 \frac{v_x b^2}{D_{TH}}, \quad (6.161)$$

$$L_{MHP} = 0,536 \frac{v_x b^2}{D_{TH}}. \quad (6.162)$$

Współczynniki dyfuzji określamy tu ze wzoru (6.72), lub relacjami analogicznymi.

Podkreślmy, że długość strefy dyfuzji jest większa niż dystans przecięcia brzegu L_C (rys. 6.15), bowiem strefa ta obejmuje obszar wyrównywania stężenia w całym przekroju strumienia, a nie tylko obszar pierwszego kontaktu brzegu z migrującą substancją. Jednak w niektórych przypadkach istotne może być wyznaczenie wartości L_C . Punkt ten rozdziela bowiem dwie strefy pola bliskiego, mające w istocie rzeczy jakościowo różny charakter (dla $x < L_C$ woda wzdłuż jednego brzegu nie zawiera składnika emitowanego na drugim brzegu). Może to mieć istotne konsekwencje praktyczne. Przykładowo, na brzegu „czystym” przy $x < L_C$ można teoretycznie rozważać lokalizację kąpieliska, którego istnienie dla $x > L_C$ mogą wykluczać substancje wprowadzane do wody na przeciwnym brzegu. W przypadku wylotu brzegowego dystans przecięcia brzegu może być obliczony z następującego wzoru [110]:

$$L_C = 0,054 \frac{v_x b^2}{D_{TH}} \quad (6.163)$$

6.5.4. Wyloty kanalizacyjne

Mianem wylotów kanalizacyjnych określa się urządzenia techniczne, służące do wprowadzania ścieków (oczyszczonych lub surowych) do odbiornika (rzeki, jeziora, stawu, morza lub do innych cieków lub zbiorników wodnych).

Przy planowaniu i projektowaniu wylotów trzeba rozważyć dwa aspekty ich eksploatacji: *konstrukcyjny* i *funkcjonalny*. Jeśli chodzi o pierwszy z nich, to należy pamiętać, że wyloty kanalizacyjne są stosunkowo złożonymi obiektami hydrotechnicznymi. Mimo małych rozmiarów (w stosunku do innych budowli wodnych) należy je starannie projektować (np. [7, 174, 175]), gdyż sytuuje się je w złożonych warunkach geologicznych, hydrologicznych i meteorologicznych (znaczne spadki terenu na brzegach cieków i zbiorników wodnych, zmienne warunki przepływu i zmienne stany wody w odbiorniku, w tym sztormy i fale powodziowe, warunki lodowe w okresie zimowym).

Tutaj interesuje nas jednak głównie funkcjonalny aspekt tych urządzeń, związany z zapewnieniem właściwego stopnia wymieszania odpływających wylotem ścieków z wodami odbiornika.

Wymóg ten w zasadniczym stopniu regulowany jest przez akty prawne. Ulegają one okresowym zmianom, toteż ich ważność zawsze należy przed zastosowaniem weryfikować. Jednak niezależnie od aktualnie obowiązujących regulacji prawnych, określających dopuszczalny skład odprowadzanych ścieków, położenie i ukształtowanie wylotu kanalizacyjnego powinno zapewniać możliwie najszybsze rozcieńczenie ścieków wodą odbiornika. Możemy tu mieć do czynienia z dwoma typami zadań:

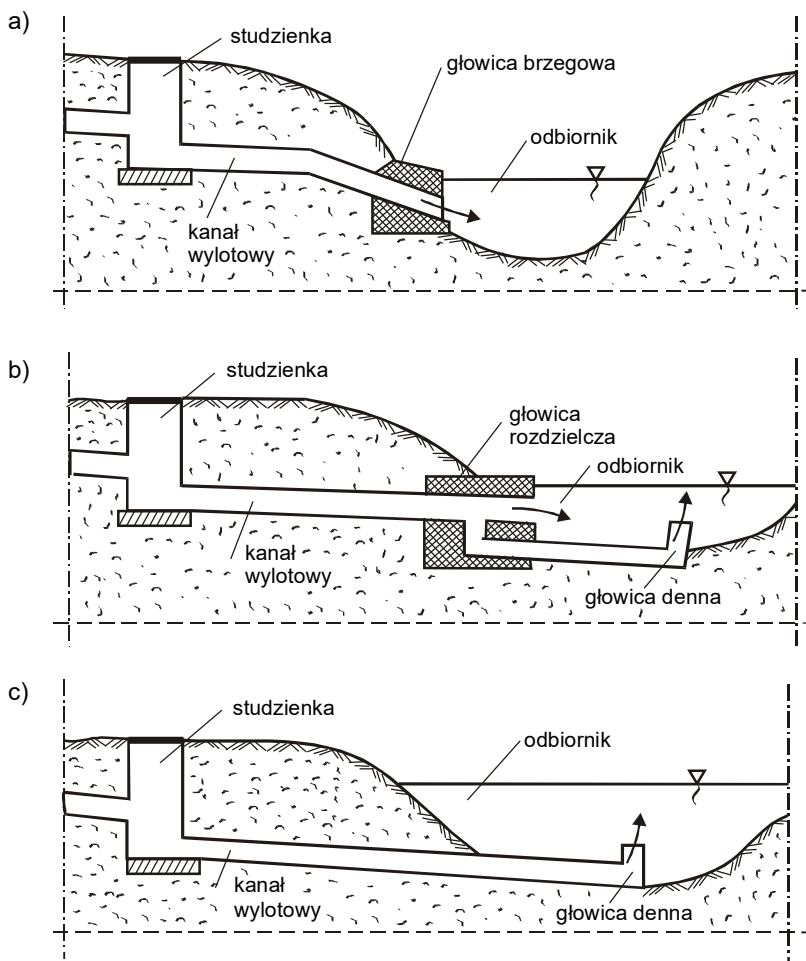
- 1) projektowanie nowych wylotów,
- 2) analiza skutków funkcjonowania wylotów już istniejących.

W ujęciu ogólnym jako podstawowy materiał do dyskusji możemy wykorzystać rozwiązania (mniej lub bardziej dokładne) poprzednio omówionych równań transportu masy oraz/lub energii. Tak wysoki poziom dokładności należy zastosować w przypadkach dużych obiektów, zlokalizowanych w odbiornikach, które odgrywają istotną rolę w gospodarce wodnej (wyloty ścieków z dużych miast, usytuowane w korytach dużych rzek lub w morzu).

W przypadkach mniej istotnych można posłużyć się metodami uproszczonymi (rozdz. 10). Wreszcie dla małych obiektów (np. lokalnych wylotów kanałów deszczowych, odwadniających drogi) dopuszczalne jest ograniczenie się do ogólnych wytycznych, które przedstawiemy nieco dalej.

Wyloty możemy podzielić na trzy zasadnicze kategorie:

- 1) *wyloty brzegowe* (rys. 6.22a);
- 2) *wyloty denno-brzegowe* (rys. 6.22b);
- 3) *wyloty denne* (rys. 6.22c), wśród których wyróżniamy wyloty jednostrumieniowe (z jednym otworem odpływowym) oraz wielostrumieniowe (zaopatrzone w jedną lub kilka głowic lub dyfuzorów, rozpraszających ścieki).



Rys. 6.22. Schematy wylotów kanalizacyjnych (a – brzegowy, b – denno-brzegowy, c – denny)

Prędkość wypływu ścieków nie powinna być mniejsza od 0,7 m/s w przypadkach wylotów rzecznych, zaś leżeć w przedziale 0,6 – 1,0 m/s dla wylotów usytuowanych w zbiornikach wodnych.

Wyloty brzegowe są tańsze i prostsze. Stosuje się je przy wyższych stopniach oczyszczenia ścieków oraz wtedy, gdy warunki dynamiczne w odbiorniku zapewniają dobre rozproszenie ścieków. W przeciwnym razie, gdy musimy zwrócić uwagę na poprawę warunków mieszania, nawet za cenę wzrostu kosztów inwestycji, należy stosować wyloty denne. Z kolei wyloty denno-brzegowe stosuje się w przypadku istotnej zmienności składu i ilości ścieków (np. kanalizacja ogólnospławna lub deszczowa). W takim przypadku małe ilości silnie zanieczyszczonych ścieków kierowane są do części dennej wylotu, zaś przy dużych wydatkach, gdy ścieki są względnie mało zanieczyszczone, zasadniczy odpływ odbywa się częścią brzegową wylotu.

Wylot rzeczny należy sytuować na wąskim odcinku rzeki, a jeśli jej oś nie jest prosta, to na *brzegu wklęsłym*. Gdy rzeka ulega rozwidleniu (naturalnemu, lub wynikającemu z budowy sztucznego kanału), wylot należy umieszczać tak, aby wypływająca struga ścieków została skierowana do koryta głównego. Jest to bardzo istotny wymóg, gdyż często nad drugorzędym korytem sytuowane są tereny rekreacyjne (kąpieliska, porty wodne, przystanie). Decyzja o lokalizacji takiego obiektu musi uwzględniać strefy ruchu i cumowania statków.

Głowica wylotu musi być zabezpieczona przed zamulaniem lub zasypaniem przez rumowisko, jak też chroniona przed zamarzaniem. Unikać należy miejsc, w których często powstają zatory lodowe. Gdy stany wody ulegają znacznym wahaniom, należy zapewnić szczególnie częstą kontrolę obiektu przez służby techniczne właściciela.

Dno wylotu brzegowego powinno być – w miarę możliwości – usytuowane na rzędnej najniższego poziomu wody.

Należy brać pod uwagę sposób użytkowania wód odbiornika, zarówno aktualny, jak i planowany w przyszłości.

Wyloty kanalizacyjne w zbiornikach wodnych mają z reguły gorsze warunki rozpraszania ścieków (szczególnie w jeziorach i zbiornikach o ograniczonej dynamice). Tym staranniej więc należy je projektować, sytuując głowice w strefach otwartych na ruch wody i na działanie wiatru. Należy unikać zatok i płyczn.

W przypadku mórz warunki mieszania są z reguły na tyle dobre (falowanie wiatrowe), że kompensują one gorsze warunki natleniania słonej wody. Istotnym zjawiskiem jest tu różnica gęstości wody i ścieków, wynikająca często z różnicy temperatury i zasolenia. W efekcie ścieki mogą „wypływać” na powierzchnię wody, tworząc wyraźne „plamy” zanieczyszczonej wody. Wielkość takiej „plamy”, zależnie od *liczby równoważnych mieszkańców LRM*, w bardzo orientacyjny sposób można oszacować jak następuje:

dla LRM rzędu 10 000 – powierzchnia „plamy” jest rzędu	32 ha;
dla LRM rzędu 25 000 – powierzchnia „plamy” jest rzędu	60 ha;
dla LRM rzędu 50 000 – powierzchnia „plamy” jest rzędu	100 ha;
dla LRM rzędu 100 000 – powierzchnia „plamy” jest rzędu	180 ha;
dla LRM rzędu 1 000 000 – powierzchnia „plamy” jest rzędu	400 ha.

Z rozważań przeprowadzonych w poprzednim paragrafie wyraźnie widzimy, że duży wpływ na intensywność rozproszenia strumienia ścieków ma stopień ich wymieszania z wodą odbiornika na samym początku, w rejonie wylotu. Warunki tego wstępnego mieszania określone są przez ukształtowanie samego otworu wylotowego (lub większej liczby takich otworów), czyli ukształtowanie *głowicy wylotu*.

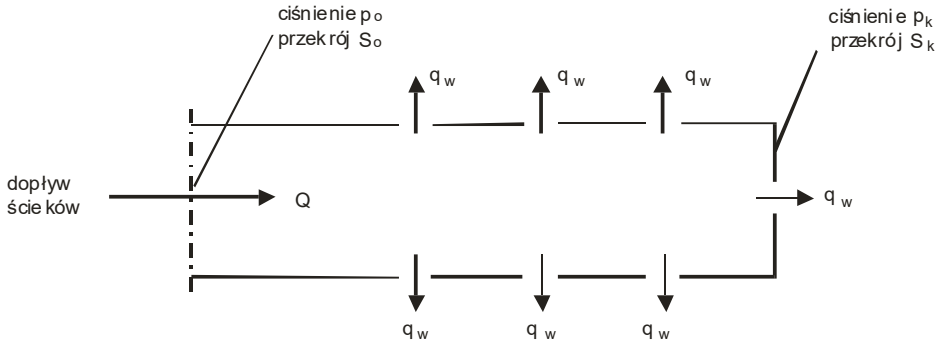
W najprostszym przypadku głowica może mieć postać prostego zakończenia przewodu (na przykład wygiętego ku górze, dla ochrony przed zamulaniem), ale może też tworzyć dość złożony układ (przewody perforowane; otwory wylotowe z nasadkami lub przystaw-

kami, kierującymi strumień ścieków w różne strony; wielokrotne rozgałęzienie przewodu tłocznego, zapewniające wielostrumieniowy wypływ ścieków lub inne rodzaje dyfuzorów wylotowych).

Im bardziej złożony charakter ma głowica wylotu, tym większe są oczywiście koszty jej projektu i wykonania, lecz zarazem tym lepsze efekty jego działania. Z tego względu konkretne rozwiązanie zawsze będzie kompromisem pomiędzy możliwościami i potrzebami stron procesu inwestycyjnego.

Dokładny projekt wylotu można wykonać na podstawie rozwiązania równań transportu zanieczyszczeń, omówionych w poprzednich rozdziałach, przy czym dużą wagę należy przywiązać na sposób określania pola prędkości cieczy w rejonie wylotu (szczególnie w strefie strumienia – rys. 6.16, patrz też par. 10.5.3). Dla większych obiektów wskazane jest wykonanie badań modelowych w warunkach laboratoryjnych.

Niezwykle ważna jest kwestia wytrzymałości wylotu. Obok zewnętrznych czynników dynamicznych, uwzględnianych zgodnie z zasadami mechaniki budowli [7, 29], szczególnie istotne jest obciążenie wewnętrzne, działające na obiekt wskutek zmiany pędu strumienia wypływających ścieków.



Rys. 6.23. Głowica wylotu w postaci dyfuzora

Przyjmując bardzo często stosowany w praktyce schemat głowicy w postaci poziomego przewodu, w którego poboczniczy wykonano N otworów o średnicy d_w (rys. 6.23), można działającą na obiekt osiową siłę R obliczyć z równania zachowania pędu w postaci jednowymiarowej [101]:

$$R = \rho Q^2 / S_o - \rho q_w^2 / S_w + p_o S_o - p_k S_k \quad (6.164)$$

gdzie:

$$q_w = Q / N \quad , \quad S_w = \pi d_w^2 / 4 \quad (6.165)$$

W przypadku dużych wylotów siła R może stanowić poważne zagrożenie dla trwałości obiektu.

7. DYSPERSJA MASY I ENERGII

7.1. Omówienie pojęcia dyspersji

7.1.1. Uwagi ogólne

Równanie zachowania masy substancji rozpuszczonej (4.80) uzupełnione równaniem konstytutywnym (4.84) dla strumienia względnego (powszechnie określanym mianem *prawa Ficka*) mówi, że zmiana stężenia tej substancji powodowana jest *adwekcją*, *dyfuzją* (*molekularną* – gdy adwekcja opisana jest przez rzeczywiste pole prędkości, zaś *turbulentną* – gdy posłużymy się prędkością poddaną uprzedniej filtracji, opisanej relacją (6.2)) oraz *reakcjami* i *przemianami*. Analiza tych trzech czynników pozwala zauważyć, że:

- 1) *adwekcja* powoduje przemieszczanie masy w przestrzeni, przy czym poszczególne wartości stężenia nie ulegają w czasie ruchu zmianom, choć (w zmiennym polu prędkości) zmianie może ulec cały rozkład stężenia (poszczególne rzędne tego rozkładu mogą się od siebie oddalać, lub zbliżać – rys. 6.10a);
- 2) *dyfuzja* powoduje wyrównywanie stężenia w przestrzeni (spadek wartości większych i wzrost wartości mniejszych – rys. 6.10b);
- 3) *czynniki źródłowe* powodują spadek lub wzrost stężenia, bez zmiany kształtu obszaru zanieczyszczonego (rys. 6.10c).

Analogiczne prawidłowości cechują proces przenoszenia energii cieplnej.

Dotychczas rozważaliśmy takie sytuacje, w których w chwili początkowej substancja rozpuszczona (oraz/lub energia cieplna) była wprowadzona do rozważonego obszaru lokalnie, w formie skoncentrowanego strumienia. Wskutek działania procesów transportu, substancja ta ulegała rozpraszaniu w płynie wypełniającym odbiornik.

Obecnie będziemy się zajmować pewną szczególną kategorią zagadnień, gdy substancja rozproszona (lub energia cieplna) wprowadzane są do odbiornika w sposób bardziej równomierny, niż poprzednio. Mamy tu dwie możliwości:

- 1) stężenie substancji (lub temperatura płynu) jest w chwili początkowej jednakowa wzdłuż dwóch zmiennych przestrzennych (np. y oraz z), zaś zmienia się wzdłuż trzeciej z nich (w tym przypadku – względem x);
- 2) stężenie to (lub temperatura) w chwili początkowej jest stałe względem jednej z tych zmiennych, zaś zależy od dwóch pozostałych.

Pierwszy z tych przypadków odpowiada takiemu wprowadzeniu masy lub energii do płynu, że ulegają one pełnemu wymieszaniu w przekroju poprzecznym strumienia tego płynu.

Umożliwia to zastąpienie modelu 3D przez model 1D. Stan taki można osiągnąć zarówno bezpośrednio w miejscu emisji zanieczyszczeń (np. dzięki zastosowaniu odpowiednio ukształtowanych wylotów), albo dopiero w pewnej odległości od wylotu (wtedy za przekrój początkowy uważamy granicę między *połem bliskim* a *połem dalekim*).

Z kolei druga z wymienionych wyżej sytuacji odnosi się do emisji zanieczyszczeń, powodującej ich wymieszanie wzdłuż jednego z wymiarów odbiornika (najczęściej – głębokości lub szerokości). Zamiast opisu 3D można tu więc zastosować model 2D.

Oba opisane wyżej stany początkowe nie są wyłącznie formalnie uproszczonymi schematami obliczeniowymi. Mają one istotne walory praktyczne i mogą służyć jako dogodne modele sytuacji rzeczywistych. Szczególnym przypadkiem może tu być awaryjne zanieczyszczenie odbiornika, gdy obszar zanieczyszczony ma początkowo kształt „plastra”, usytuowanego w przekroju poprzecznym rzeki, lub „słupka” między dnem a swobodną powierzchnią wody w zbiorniku otwartym.

7.1.2. Dyspersja podłużna

Rozważmy najpierw prostą sytuację, symbolizowaną przez „plaster” zanieczyszczonego płynu w strumieniu. Stan początkowy ($t = 0$) uwidacznia rys. 7.1a – w schematycznym przekroju podłużnym strumienia (np. rzeki) oraz w postaci wykresu stężenia $c(x, t = 0)$. Profil prędkości pokazuje dla takiego przypadku górny szkic na rys. 7.1b. Przyjęto, że ruch ma charakter turbulentny, co symbolizuje nierównomierny kształt profilu prędkości. Wskutek poprzecznej zmienności tego profilu, różne elementy początkowego „plastra” płynu zanieczyszczonego przebędą po czasie Δt różne dystanse, skutkiem czego pionowy początkowo „plaster” ulegnie specyficznemu wygięciu (środkowy rys. 7.1b). Poza tym wygięciem, powodowanym przez adwekcję, granica obszaru zanieczyszczonego ulegnie „rozmyciu” wskutek dyfuzji (molekularnej i burzliwej). Ponadto nie możemy wykluczyć występowania pewnych drugorzędnych prądów adwekcyjnych, intensyfikujących poprzeczne mieszanie substancji rozpuszczonej (strzałki na rys. 7.1b).

W rezultacie rozkład stężenia substancji rozpuszczonej, z początkowo jednowymiarowego $c = c_o(x, t = 0)$, stanie się zmienny w całej przestrzeni, czyli będzie opisany funkcją $c = c(x, y, z, t = \Delta t)$. *Podkreślmy wyraźnie, że zróżnicowanie to jest powodowane przez zmienność pola prędkości, będącego czynnikiem adwekcyjnym.* Jest to efekt nieunikniony, gdyż każde rzeczywiste pole prędkości płynu zmienia się w przestrzeni.

W ujęciu dokładnym stwierdzenie powyższe oznacza tyle, że nawet jeśli początkowy rozkład stężenia jest równomierny (w tym przypadku zależny tylko od zmiennej x), co może stwarzać pokusę posłużenia się jednowymiarowym modelem transportu, to wskutek zróżnicowania pola prędkości rozkład stężenia będzie się komplikował.

Z drugiej jednak strony, to powodowane adwekcją zróżnicowanie pola stężenia ulegnie w pewnym stopniu złagodzeniu wskutek wyrównującego działania dyfuzji oraz wspomnianych już prądów drugorzędnych. Pojawia się więc możliwość posłużenia się polem prędkości uśrednionym względem przekroju poprzecznego strumienia S , zgodnie z relacją

$$\tilde{c}(x, t) = \frac{1}{S} \int_S c(x, y, z, t) dS. \quad (7.1)$$

Dla pola temperatury mamy oczywiście

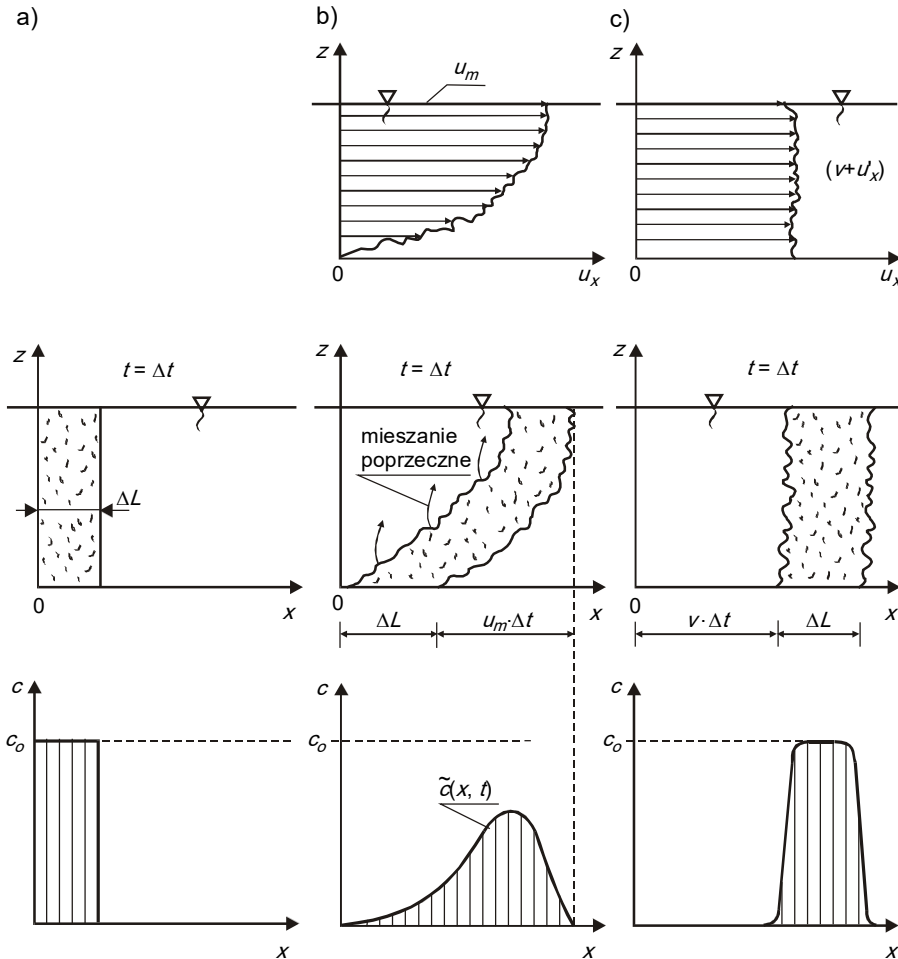
$$\tilde{T}(x, t) = \frac{1}{S} \int_S T(x, y, z, t) dS. \quad (7.2)$$

Uśredniony zgodnie z (7.1) rozkład stężenia jest funkcją czasu t i zmiennej x (dolny szkic na rys. 7.1b).

Zauważmy, że posługiwanie się uśrednionymi rozkładami stężenia i temperatury byłoby w pewnym stopniu sprzeczne z pełnym opisem profilu prędkości, gdy mamy $u_x = u_x(x, y, z, t)$. Rzecz naturalną byłoby tu więc wprowadzenie także *prędkości średniej* względem przekroju poprzecznego

$$v(x, t) = \frac{1}{S} \int_S u_x(x, y, z, t) dS. \quad (7.3)$$

Dla wyznaczenia takiej uśrednionej prędkości możemy wykorzystać istniejący, dość rozbudowany, aparat hydrauliki strumieni jednowymiarowych i jednokierunkowych (*przepływy podłużne* [134]), co znacznie ułatwia rozwiązywanie problemów migracji zanieczyszczeń.



Rys. 7.1. Mechanizm dyspersji jednowymiarowej (podłużnej)

Jednakże nie jest możliwe tylko formalne wprowadzenie prędkości średniej od samego początku rozważań (górną szkic na rys. 7.1c), gdyż w ten sposób moglibyśmy przeoczyć zasadniczy efekt przestrzennego różnicowania pola stężenia oraz/lub temperatury, który jakościowo opisaliśmy wyżej. Jeżeli bowiem będziemy rozważali tylko adwekcję z prędkością średnią, wtedy początkowy „plaster” cieczy zanieczyszczonej ulegnie tylko równoległemu przesunięciu i nieznacznemu „rozmyciu” wskutek dyfuzji (środkowy rys. 7.1c). W efekcie uśredniony według (7.1) rozkład stężenia (dolny rys. 7.1c) będzie bardzo różnił się od rozkładu, uwzględniającego rzeczywisty przebieg zjawiska (dolny rys. 7.1b).

Mamy więc dwie możliwości:

- 1) starać się możliwie dokładnie opisać proces migracji zanieczyszczeń, posługując się zmiennymi w przestrzeni i w czasie polami prędkości i stężenia;
- 2) zdecydować się na uśredniony opis pół prędkości i stężenia oraz/lub temperatury.

To pierwsze rozwiązanie jest dość kłopotliwe, gdyż wymaga użycia trudniejszych do rozwiązania ogólnych równań rządzących analizowanymi procesami (które to równania szczegółowo omówiliśmy w poprzednich rozdziałach). Chętnie będziemy więc stosowali drugie z tych podejść, jednak musimy w tym celu znaleźć sposób ilościowego opisu wpływu rzeczywistego pola prędkości na wydłużanie rozkładu stężenia, przy jednoczesnym opisie adwekcji za pomocą prędkości średniej $\mathbf{u}(x, t)$. Omawiany tu efekt nosi nazwę *dyspersji masy* (i odpowiednio – *dyspersji energii cieplnej*). W tym zakresie, gdy wydłużanie rozkładu stężenia odbywa się wzdłuż kierunku ruchu głównego, będziemy mówili o *dyspersji podłużnej*. Jest ona z natury rzeczy zjawiskiem jednowymiarowym, w ogólnym przypadku – nieustalonym.

7.1.3. Dyspersja płaska

Obecnie przeanalizujemy drugą ze wspomnianych możliwości, gdy początkowy kształt obszaru zanieczyszczonego ma formę „słupka”, określonego funkcją $c = c_0(x, y, t = 0)$, przedstawionego schematycznie na rys. 7.2 (dla zbiornika wodnego o głębokości H).

Istota rozumowania będzie tu identyczna z opisaną w poprzednim paragrafie. Musimy tylko wziąć pod uwagę, że w tym przypadku wektor prędkości uśredniamy względem tylko jednego z wymiarów przestrzennych, a więc zmienia się on wzdłuż dwóch pozostałych wymiarów. Dla schematu jak na rys. 7.2 mamy

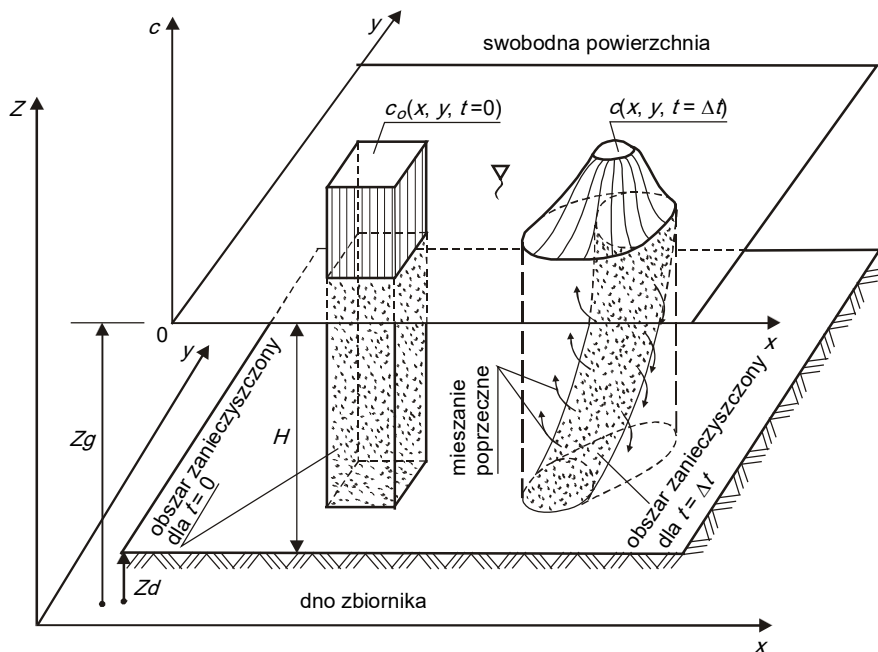
$$\mathbf{u}(x, y, t) = \bar{\mathbf{u}}(x, y, z, t) = \frac{1}{H} \int_{z_d}^{z_g} \mathbf{u}(x, y, z, t) dZ, \quad (7.4.)$$

gdzie $z_d(x, y, t)$ oraz $z_g(x, y, t)$ są funkcjami, opisującymi odpowiednio kształt dna odbiornika oraz kształt swobodnej powierzchni cieczy.

Tak więc możemy stwierdzić, że początkowo zwarty „słupek” cieczy zanieczyszczonej ulegnie deformacji adwekcyjnej, z jednoczesnym rozproszeniem wskutek działania procesów dyfuzyjnych oraz prądów drugorzędnych. W rezultacie początkowo prosty rozkład stężenia ulegnie zróżnicowaniu przestrzennemu i opisany będzie funkcją wszystkich trzech zmiennych geometrycznych $c(x, y, z, t)$. Jeżeli jednak chcemy (i możemy) pominąć zależność tej funkcji od jednej z tych zmiennych, czyli chcemy posłużyć się stężeniem średnim

$$\tilde{c}(x, y, t) = \frac{1}{H} \int_{z_d}^{z_g} c(x, y, z, t) dZ, \quad (7.5)$$

jednocześnie opisując pole prędkości za pomocą wektora uśrednionego (7.4), to musimy umieć uwzględnić wpływ rzeczywistej zmienności tego pola na wynikową deformację początkowego rozkładu stężenia (rys. 7.2). Proces ten nazywamy *dyspersją płaską*.



Rys. 7.2. Mechanizm dyspersji płaskiej

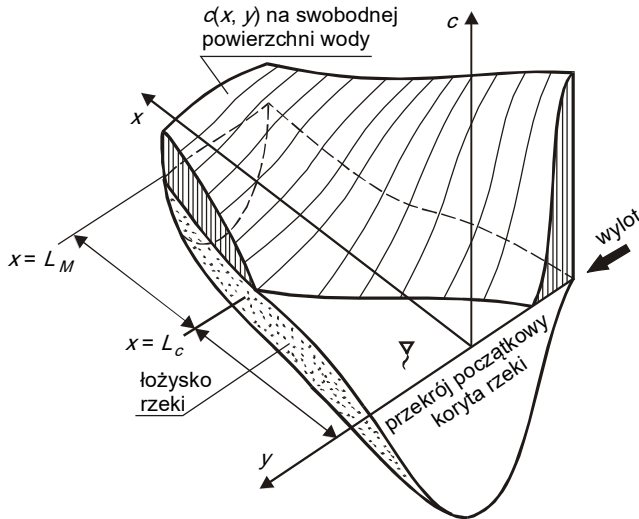
7.1.4. Pojęcie dyspersji a przebieg procesu migracji zanieczyszczeń

Podkreślmy zasadniczą cechę omawianego tu zjawiska: *z dyspersją mamy do czynienia wtedy, gdy chcemy wyznaczyć uśredniony rozkład stężenia oraz/lub temperatury płynu, posługując się uproszczonym polem prędkości adwekcji*, według (7.3) lub odpowiednio (7.5). Alternatywnym rozwiązaniem jest zawsze możliwość wyznaczenia przestrzennych rozkładów tych wielkości (i ich ewentualne uśrednienie w następnej kolejności). Są one opisane równaniami nieustalonej adwekcji-dyfuzji (najczęściej – turbulentnej) – patrz rozdz. 6. Jest to jednak możliwość znacznie zwiększająca czasochłonność i koszty uzyskania rozwiązania, co z kolei podnosi atrakcyjność modeli przybliżonych. Proces dyspersji stanowi więc „pomost”, zapewniający akceptowany technicznie poziom dokładności rozwiązania i trudności formalnych.

Zanim przystąpimy do ilościowego opisu dyspersji, musimy najpierw przedyskutować kwestię jej praktycznego usytuowania.

Substancje zanieczyszczające są emitowane do odbiorników z reguły w postaci zwartych strumieni. Wynika to ze względów technicznych, gdyż instalacje tranzytowe, łączące miejsce powstawania tych zanieczyszczeń z miejscami ich emisji, nie powinny mieć zbyt dużych wymiarów. Ten strumień wlotowy ulega mieszanii z płynem wypełniającym odbiornik, stopniowo rozprzestrzeniając się. Ze względu na realne ograniczenie rozmiarów odbiorników, płyn zanieczyszczony dociera w końcu do granic odbiornika (dna i brzegów

cieków i zbiorników wodnych; do swobodnej powierzchni cieczy; do powierzchni Ziemi, gdy odbiornikiem zanieczyszczonych gazów jest atmosfera ziemska), co schematycznie pokazano na rys. 7.3 (patrz też par. 6.5.3).



Rys. 7.3. Schemat pola bliskiego w rzece

Jeżeli prędkość własna wprowadzanego do odbiornika płynu zanieczyszczonego jest wyraźnie większa od prędkości w odbiorniku, wtedy przebieg mieszania jest w pierwszej kolejności zależny od charakteru wylotu (*strefa strumienia* – rys. 6.16).

Po wytlumieniu początkowej energii emitowanego strumienia, proces migracji zanieczyszczeń jest kształtowany przez adwekcję w odbiorniku oraz przez procesy mieszania względnego (*strefa dyfuzji*). Obie strefy razem tworzą *pole bliskie*. Sposoby przybliżonego określania długości tego pola omówiliśmy w par. 6.5.3. Zależy ona od usytuowania wylotu w przekroju poprzecznym odbiornika, ale jest też ściśle związana z rozmiarami odbiornika. Analizując wzory (6.155) i (6.161), widzimy, że stosunek długości strefy dyfuzji w kierunku poziomym (ku brzegom strumienia) do jej długości w kierunku pionowym (do dna i swobodnej powierzchni) wyraża się relacją

$$L_{MH}/L_{MV} = \frac{D_{TV}b^2}{D_{TH}h^2}. \quad (7.6)$$

Po uwzględnieniu wzorów (6.67) i (6.72) otrzymujemy $D_{TV}/D_{TH} = 0,5$. Jeżeli teraz przyjmiemy, że dla naturalnych cieków szerokość b jest rzędu 10 razy większa od głębokości h , to mamy

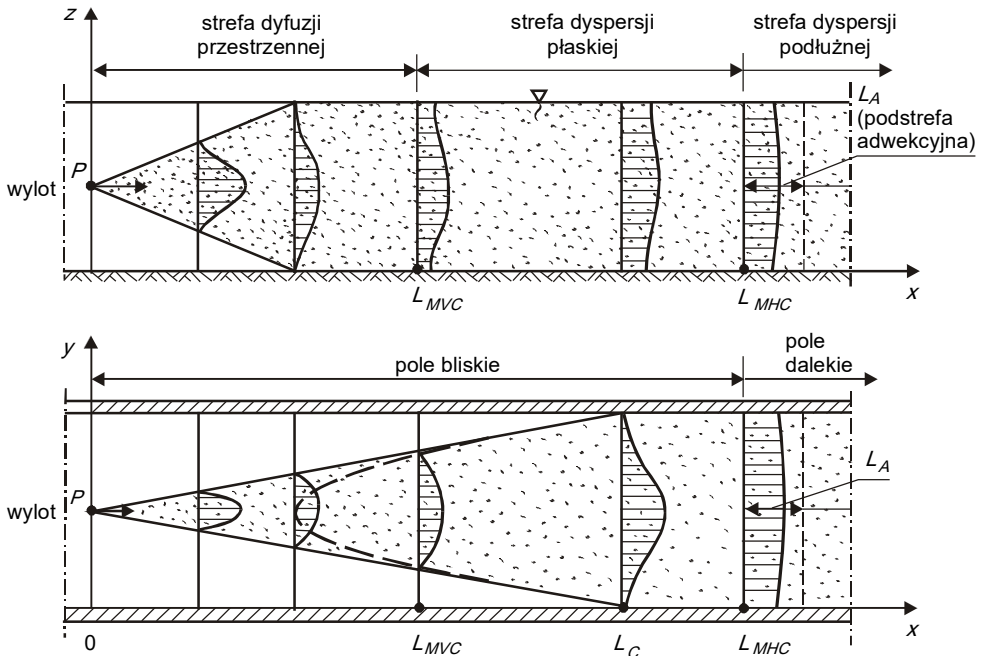
$$L_{MH}/L_{MV} > 50. \quad (7.7)$$

Widzimy więc, że całkowita długość pola bliskiego jest znaczna, głównie ze względu na proces mieszania poprzecznego w kierunku poziomym. Mieszanie poprzeczne w pionie odbywa się na znacznie krótszym dystansie (6.158), co zaznaczono na rys. 7.4.

Zajmijmy się najpierw sytuacją w polu dalekim, dla $x > L_{MH}$. Jest to obszar, na początku którego stężenie substancji rozpuszczonej oraz/lub temperatura płynu jest stała w przekroju poprzecznym strumienia. Jeżeli więc mamy do czynienia ze stosunkowo prostą sytu-

acją, w której emisja zanieczyszczeń jest stała w czasie ($m_{zi} = \text{const}$) oraz migrujące substancje nie ulegają żadnym przemianom ($Z_i = 0$), to w całym polu dalekim utrzymuje się stała wartość stężenia $c_{w_{di}}$ każdego z i składników. Jest to bardzo ważny wniosek praktyczny, gdyż oznacza, że zmienny rozkład stężenia oraz/lub temperatury panuje tylko w polu bliskim. Jeżeli interesuje nas wnętrze tego pola, to możemy wyznaczyć charakterystykę procesu migracji, rozwiązując omówione już równania. Gdy jednak wartość L_{MH} jest w rozważanym przypadku pomijalnie mała, czyli gdy interesuje nas wyłącznie pole dalekie, wtedy wartość stężenia w tym polu możemy obliczyć ze wzoru (4.260) lub (6.147). Gdy rozważamy migrację energii cieplnej, wtedy mamy oczywiście

$$T_{di} = \frac{Q_w T_w + Q_s T_s}{Q_w + Q_s}. \quad (7.7)$$



Rys. 7.4. Rozprzestrzenianie się substancji rozpuszczonej w polu bliskim i w polu dalekim

Byłby to jednak przypadek bardzo prosty, nieczęsto spotykany w praktyce. Zupełnie inaczej wygląda przebieg zjawiska, gdy intensywność zrzutu zanieczyszczeń zmienia się w czasie, czyli gdy $m_{zi} = f(t)$, lub gdy zanieczyszczenia te ulegają reakcjom ($Z_i \neq 0$), lub gdy oba te czynniki występują razem. W początkowym przekroju pola dalekiego ($x = L_{MH}$) w różnych momentach czasu pojawiają się różne wartości stężenia oraz/lub temperatury cieczy. Z dobrym dla praktyki przybliżeniem możemy obliczyć je z bilansowych wzorów (4.260) i (7.7), uzmienniając występujące w nich wielkości, czyli pisząc

$$c_{w_{di}}(t) = \frac{Q_w c_{w_{gi}}(t) + Q_s(t) c_{Si}(t)}{Q_w(t) + Q_s(t)}, \quad (7.8)$$

$$T_{di}(t) = \frac{Q_W T_W(t) + Q_S(t) T_S(t)}{Q_W(t) + Q_S(t)}. \quad (7.9)$$

Musimy tylko pamiętać, że przy zmianie wydatków Q_W i Q_S zmianie ulega długość pola bliskiego L_{MH} .

Te kolejne wartości stężenia oraz/lub temperatury możemy interpretować jako kolejne „plastry” płynu zanieczyszczonego, wpływające do pola dalekiego. Pozwala nam to na powtórzenie rozumowania, przedstawionego w par. 7.1.2. W konsekwencji stwierdzamy, że wskutek różnicującego działania zmiennego pola prędkości te kolejne „plastry” będą ulegały deformacji, nakładając się na siebie wzajemnie, czyli zaczną się uwidaczniać proces *ciągłej dyspersji*, a pole dalekie stanie się *strefą dyspersji podłużnej* (co zaznaczono na rys. 6.16 oraz 7.4).

Wróćmy teraz do analizy struktury pola bliskiego. Zauważmy, że dla wartości $x > L_{MV}$ mamy sytuację jakościowo różną niż dla $x < L_{MV}$. Otóż od momentu uzyskania pełnego wymieszania substancji rozpuszczonej w pionie, możemy posłużyć się prędkościami oraz stężeniem lub temperaturą uśrednionymi względem głębokości, zgodnie z (7.4) i (7.5), a tym samym zastosować w obszarze $L_{MV} < x < L_{MH}$ *model dyspersji płaskiej* (par. 7.1.3).

Innymi słowy, mamy dwie możliwości potraktowania pola bliskiego. Albo w całym jego obszarze pole prędkości opisujemy dokładnie (wyznaczając strefę dyfuzji i ewentualnie strefę strumienia – rys. 6.16), albo też osobno opisujemy *strefę dyfuzji przestrzennej* (z ewentualną strefą strumienia), oraz osobno – *strefę dyspersji płaskiej* (rys. 7.4). W przypadkach niedużych cieków wydzielanie strefy dyspersji płaskiej może nie być celowe, ale dla rzek o znacznych szerokościach oraz oczywiście dla rozległych zbiorników (morza, oceany) możemy w ogóle nie mieć do czynienia ze strefą dyspersji podłużnej. W takich przypadkach wręcz można ograniczyć pole bliskie do strefy strumienia oraz strefy dyfuzji przestrzennej, zaś strefę dyspersji płaskiej traktować jako pole dalekie.

Na zakończenie tego podrozdziału dodajmy jeszcze, że w niektórych przypadkach, gdy pionowe rozmiary odbiornika są bardziej istotne od jednego z wymiarów poziomych, celowe może być rozważanie dyspersji dwuwymiarowej w płaszczyźnie pionowej (patrz podrozdz. 7.4).

7.2. Ilościowy opis dyspersji podłużnej

7.2.1. Przekształcenie równań ogólnych

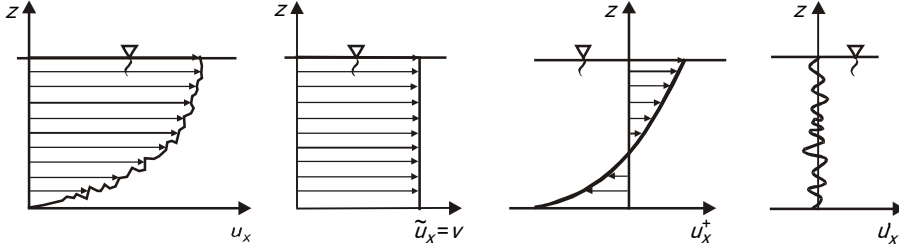
Przedstawione w poprzednim podrozdziale rozumowanie, wyjaśniające pojęcie *dyspersji*, pozwala na proste wyprowadzenie równań, uwzględniających wpływ tego procesu. Zauważmy od razu, że istota odpowiednich przekształceń jest w pełni analogiczna do sposobu postępowania, jaki szczegółowo omówiliśmy w rozdz. 6, poświęconym turbulentnej wymianie masy i energii. Punktem wyjścia jest tu dekompozycja wektora prędkości oraz funkcji opisujących stężenie i temperaturę, polegająca na przedstawieniu ich w postaci sumy *wartości średnich* (zdefiniowanych relacjami (7.1), (7.2) i (7.3)), *odchyłek* (które oznaczymy indeksem „plus”) oraz *turbulentnych fluktuacji* (oznaczonych indeksem „prim”), zgodnie z następującymi relacjami:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(x, y, z, t) &= \bar{\mathbf{u}}(x, y, z, t) + \mathbf{u}'(x, y, z, t) = \tilde{\mathbf{u}}(x, t) + \mathbf{u}^+(x, y, z, t) + \mathbf{u}''(x, y, z, t) = \\ &= \mathbf{v}(x, t) + \mathbf{u}^+(x, y, z, t) + \mathbf{u}'(x, y, z, t), \end{aligned} \quad (7.10)$$

$$\alpha(x, y, z, t) = \tilde{c}(x, t) + c^+(x, y, z, t) + c'(x, y, z, t), \quad (7.11)$$

$$T(x, y, z, t) = \tilde{T}(x, t) + T^+(x, y, z, t) + T^-(x, y, z, t). \quad (7.12)$$

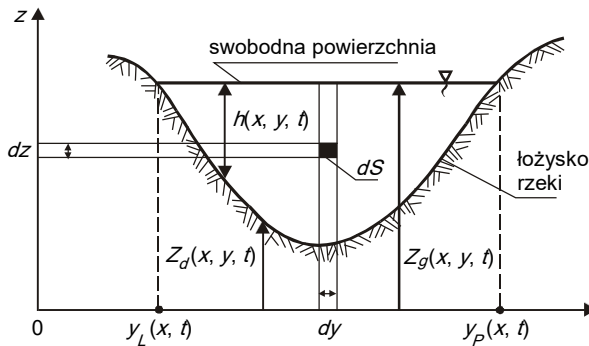
Rozdział interesujących nas funkcji na te trzy składowe ilustruje rys. 7.5 (dla przykładowej składowej prędkości w głównym kierunku ruchu $0x$).



Rys. 7.5. Składowe pola prędkości rzeczywistej

Wiemy już (rozdz. 6), że fluktuacyjne części powyższych sum generują w równaniach transportu człony, odpowiadające za turbulentne przenoszenie masy i energii. Nie będziemy więc ich dalej analizować, przyjmując za punkt wyjścia równanie burzliwej adwekcji-dyfuzji (6.109).

Aby przekształcić je do postaci zawierającej prędkość średnią v oraz średnie stężenie \bar{c} , obie jego strony musimy uśrednić względem przekroju poprzecznego strumienia. Zapis ogólny tej operacji pokazuje relacja (7.1), lecz dla uzyskania konkretnych efektów musimy posłużyć się szczegółowym opisem przekroju poprzecznego S . Przyjmijmy więc schemat, jak na rys. 7.6.



Rys. 7.6. Opis kształtu przekroju poprzecznego strumienia

Całkując obie strony równania (6.109), otrzymamy następującą relację:

$$\begin{aligned} \frac{1}{S} \int_{y_L(x,t)}^{y_p(x,t)} \int_{z_d(x,y,t)}^{z_g(x,y,t)} \left[\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{u}\bar{c}) \right] dz dy = \\ = \frac{1}{S} \int_{y_L(x,t)}^{y_p(x,t)} \int_{z_d(x,y,t)}^{z_g(x,y,t)} \left[\text{div}\{(D_M + D_T) \text{grad } \bar{c}\} + \bar{Z} \right] dz dy. \end{aligned} \quad (7.13)$$

Wykonanie możliwych przekształceń powyższej zależności jest pouczającym ćwiczeniem, toteż tutaj ograniczymy się tylko do wypunktowania podstawowych czynników, które należy w trakcie takich przekształceń uwzględnić.

W pierwszym rzędzie jest tu *twierdzenie o różniczkowaniu pod znakiem całki o zmiennych granicach*, które ma następującą postać [11]:

$$\int_{\alpha(y)}^{\beta(y)} \frac{\partial f}{\partial y} dx = \frac{\partial}{\partial y} \int_{\alpha(y)}^{\beta(y)} f(x, y) dx - \frac{\partial \beta(y)}{\partial y} f(\beta, y) + \frac{\partial \alpha(y)}{\partial y} f(\alpha, y). \quad (7.14)$$

Podkreślmy, że gdy zarówno całkowanie, jak i różniczkowanie, dotyczą tej samej zmiennej, wtedy możemy wykorzystać definicję *różniczki zupełnej*, pisząc

$$\int_{\alpha(y)}^{\beta(y)} \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} dx = \int_{\alpha(y)}^{\beta(y)} df(x, y) = f(\beta, y) - f(\alpha, y) = fg - fd. \quad (7.15)$$

Twierdzenie powyższe pozwala nam na zamianę kolejności różniczkowania i całkowania, co daje możliwość wprowadzenia średnich wartości funkcji. Pojawiające się podczas przekształceń człony, związane z różniczkowaniem granic całkowania możemy zredukować, jeśli wykorzystamy znany z hydrauliki [134] *kinematyczny warunek na swobodnej powierzchni*, zgodnie z którym

$$\frac{\partial z_g}{\partial t} + u_{xg} \frac{\partial z_g}{\partial x} + u_{zg} \frac{\partial z_g}{\partial y} = u_{zg}, \quad (7.16)$$

oraz analogiczny *kinematyczny warunek na dnie*

$$\frac{\partial z_d}{\partial t} + u_{xd} \frac{\partial z_d}{\partial x} + u_{yd} \frac{\partial z_d}{\partial y} = u_{zd}. \quad (7.17)$$

Istotne jest też stwierdzenie, że w stosowanym tu modelu uśrednionym poprzeczna zmienność stężenia jest pomijalnie mała, czyli

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \approx 0, \quad \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \approx 0. \quad (7.18)$$

W przeciwnym razie mielibyśmy bowiem do czynienia ze zróżnicowanym polem stężenia, którego opis wymagałby bardziej rozbudowanego modelu.

Uwzględniając powyższe, otrzymamy zamiast (7.13) następującą relację:

$$\frac{\partial(\bar{c}S)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{c}\tilde{u}_x S)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[(D_M + D_T) S \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right] + \tilde{Z}S. \quad (7.19)$$

Średnią wartość iloczynu $\tilde{c}\tilde{u}_x$ obliczymy, wykorzystując (7.10) i (7.11). Możemy napisać

$$\tilde{c}\tilde{u}_x = (\bar{c} + c^+)(v + u_x^+) = \bar{c}v + c^+u_x^+, \quad (7.20)$$

bowiem

$$\bar{c}u_x^+ = \bar{c}u_x^+ \equiv 0, \quad c^+v = c^+v \equiv 0. \quad (7.21)$$

Prędkość średnią v oraz przekrój poprzeczny strumienia S (które w ogólnym przypadku ulegają zmianie w czasie i wzdłuż strumienia) możemy wyznaczyć z klasycznych równań hydrauliki strumieni nieustalonych i niejednostajnych [134], postaci

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial(vS)}{\partial x} = 0, \quad (7.22)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + g \frac{\partial h}{\partial x} = g(i_o - i_f), \quad (7.23)$$

gdzie: i_o – spadek dna, i_f – spadek hydrauliczny

$$i_f = \frac{v^2}{C_{CH}^2 R_H}, \quad (7.24)$$

C_{CH} – współczynnik szorstkości według Chézy, R_H – promień hydrauliczny.

Uwzględniając (7.22), możemy uprościć człon adwekcyjny w (7.19) i następująco zapisać równanie jednowymiarowego transportu masy substancji rozpuszczonej:

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} = \frac{1}{S} \frac{\partial}{\partial x} \left[S(D_M + D_T) \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} \right] + \frac{1}{S} \frac{\partial}{\partial x} (\widetilde{-c^+ u_x^+ S}) + \tilde{Z}. \quad (7.25)$$

Identyczna procedura, zastosowana do równania (6.122), daje w efekcie następujące równanie jednowymiarowego transportu energii cieplnej:

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} = \frac{1}{S} \frac{\partial}{\partial x} \left[S(D_W + D_T) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} \right] + \frac{1}{S} \frac{\partial}{\partial x} (\widetilde{-T^+ u_x^+ S}) + \tilde{q}_{es}. \quad (7.26)$$

W dwóch ostatnich relacjach pojawiły się – w stosunku do równań wyjściowych (6.109) i (6.122) – dwa nowe człony. Zgodnie z omówioną już charakterystyką procesu dyspersji, mogą one być interpretowane jako odpowiednio *jednostkowy dyspersyjny strumień masy* \mathbf{m}_D oraz *jednostkowy dyspersyjny strumień energii* \mathbf{q}_D , gdzie

$$\mathbf{m}_D = \widetilde{c^+ u^+}, \quad \mathbf{q}_D = \widetilde{T^+ u^+}. \quad (7.27)$$

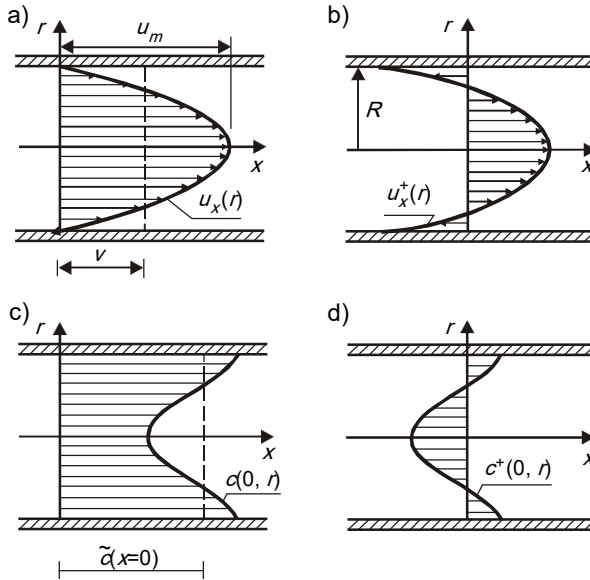
7.2.2. Wyznaczenie dyspersyjnych strumieni masy i energii

7.2.2.1. Ruch laminarny w przewodzie kołowym. Jest to przypadek na tyle prosty, że jego praktyczne znaczenie jest bardzo wąskie. Jednakże stanowi on przedmiot klasycznego zadania, którego rozwiązaniem G. I. Taylor [161] wprowadził do nauki i techniki pojęcie *dyspersji*. Tak więc przedstawimy je dość szczegółowo, głównie z powodów metodycznych.

Profil prędkości w poziomej rurze kołowej, w ruchu laminarnym, opisany jest paraboloidą obrotową (rys. 7.7a), wobec czego odchyłkę prędkości u_x^+ możemy określić następująco (101):

$$u_x^+(r) = u_x(r) - v = u_m \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) - \frac{u_m}{2} = u_m \left(\frac{1}{2} - \frac{r^2}{R^2} \right), \quad (7.28)$$

gdzie u_m oznacza prędkość maksymalną ($u_m = 2v$), a w zapisie użyto oczywistego tu cylindrycznego układu współrzędnych (x, r, φ) .



Rys. 7.7. Schemat wyjaśniający koncepcję G. I. Taylora

Drugą z potrzebnych funkcji, odchyłkę stężenia substancji rozpuszczonej c^+ , wyznaczył Taylor ze szczególnego rozwiązania równania transportu (4.194). Dla substancji trwałej $Z_i = 0$ (do badań eksperymentalnych używano wodnego roztworu chlorku sodu $NaCl$), przy uwzględnieniu osiowej symetrii zjawiska, możemy ogólne równanie uprościć do postaci

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_m \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \frac{\partial c}{\partial x} = D_M \left(\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial c}{\partial r} + \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right). \quad (7.29)$$

Dla uzyskania rozwiązania, autor omawianej tu teorii przyjął następujące założenia upraszczające:

- 1) czas poprzecznego mieszania substancji rozpuszczonej (znacznika, domieszki, zanieczyszczenia) jest bardzo krótki w porównaniu z czasem przepływu;
- 2) dyfuzja w kierunku osi $0x$ może być pominięta, gdyż dominujące znaczenie mają adwekcja podłużna i dyfuzja poprzeczna;
- 3) nie ma wymiany masy przez pobocznice strumienia;
- 4) pochodna rzeczywistego stężenia c względem zmiennej x może być zastąpiona odpowiednią pochodną stężenia średniego \tilde{c} .

Wprowadzając zmienne pomocnicze

$$z = r/R, \quad x_r = x - 0,5 u_m t, \quad (7.30)$$

możemy wobec powyższych założeń przepisać równanie (7.29) jak następuje:

$$\frac{u_M R^2}{D_M} \left(\frac{1}{2} - z^2 \right) \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_r} = \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial c}{\partial z}. \quad (7.31)$$

Ze względu na izolujące własności ścianki rurociągu oraz symetrię zagadnienia, rozwiązanie musi spełniać warunki brzegowe

$$\frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ dla } z = 0 \text{ oraz } z = 1. \quad (7.32)$$

Rozwiązanie równania (7.31) można wtedy napisać w postaci

$$c(x, z) = c(x, z=0) + \frac{u_M R^2}{8 D_M} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} \left(z^2 - \frac{1}{4} z^4 \right), \quad (7.33)$$

co umożliwi obliczenie stężenia średniego

$$\tilde{c}(x) = c(x, z=0) + \frac{u_M R^2}{24 D_M} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x}, \quad (7.34)$$

oraz odchyłki stężenia

$$c^+(x, z) = \frac{u_M R^2}{48 D_M} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} (6z^2 - 3z^4 - 2). \quad (7.35)$$

Przykładowe wykresy funkcji (7.34) i (7.35) pokazano na rys. 7.7c,d.

Podstawiając teraz (7.28) i (7.35) do (7.27) i uśredniając ten iloczyn zgodnie z (7.1), otrzymamy

$$m_{D_{mx}} = -\frac{u_M^2 R^2}{192 D_M} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} = -\frac{v^2 R^2}{48 D_M} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x}. \quad (7.36)$$

Wyrażenie to odgrywa kluczową rolę w teorii G. I. Taylora. Mówi ono, że dyspersyjny strumień masy (w tym przypadku, gdy rozważamy transport jednowymiarowy, jest to składowa m_{D_x} , skierowana wzdłuż osi $0x$) można opisać relacją o postaci formalnie identycznej z prawem Ficka (4.84), jeżeli mnożnik przed pochodną stężenia w (7.36) potraktujemy jako *współczynnik transportu*. Pisząc

$$K_{ML} = \frac{v^2 R^2}{48 D_M}, \quad (7.37)$$

definiujemy więc *współczynnik dyspersji podłużnej* dla ruchu laminarnego w zamkniętym przewodzie kołowym o stałym promieniu R .

Przekształćmy nieco powyższą zależność. Zastępując promień rury przez jej średnicę $D = 2R$ i korzystając z definicji liczby Reynoldsa (5.15), możemy napisać, że

$$v D = Re \cdot v \quad (7.38)$$

oraz wprowadzając *liczbę Schmidta* (5.12), otrzymamy następującą relację:

$$K_{ML}/D_M = Re^2 Sc^2/192. \quad (7.39)$$

Przy $Sc \sim 1000$ (patrz tab. 6 i 9), jeżeli uwzględnimy, że dla ruchu laminarnego w rurze kołowej $Re < 2300$, mamy

$$K_{ML}/D_M < 2,8 \cdot 10^{10}. \quad (7.40)$$

Jak widać, współczynnik dyspersji w ruchu laminarnym może być nawet o 10 rzędów wielkości większy od współczynnika dyfuzji molekularnej. Jest to zrozumiałe jeśli weźmiemy pod uwagę, że pojęcie dyspersji jest równoznaczne z zaliczeniem znacznej części prędkości adwekcji (rys. 7.7b) do procesów typu dyfuzyjnego.

7.2.2.2. Ruch turbulentny w przewodzie kołowym. Omówione w poprzednim punkcie rozumowanie zostało przez G. I. Taylora zastosowane do przepływu turbulentnego w rurze kołowej [162]. Punktem wyjścia dla określenia odchyłki stężenia jest równanie burzliwej dyfuzji (6.108), które przy omówionych już założeniach Taylora można zapisać następująco:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{1}{r} \frac{\partial r}{\partial r} \left(v_T r \frac{\partial c}{\partial r} \right). \quad (7.41)$$

Profil prędkości opisano tu za pomocą uniwersalnej funkcji

$$\bar{u}_x(z) = u_m - v^* f(z), \quad (7.42)$$

gdzie

$$z = r/R, \quad (7.43)$$

zaś empirycznie potwierdzony przebieg funkcji $f(z)$ pokazany jest na rys. 7.8.

Współczynnik lepkości burzliwej v_T wyznaczono bezpośrednio z hipotezy Boussinesq-Prandtla (6.9), która w tym prostym przypadku sprowadza się do relacji

$$v_T = \tau_d / \left(\rho \frac{\partial \bar{u}_x}{\partial r} \right). \quad (7.44)$$

Naprężenie przyścienne τ_d oraz prędkość dynamiczną v^* można obliczyć ze wzoru (6.66).

Po wykonaniu obliczeń (metodami numerycznymi, ze względu na graficzny przebieg funkcji $f(z)$ – rys. 7.8), otrzymuje się dla turbulentnego przepływu w rurze kołowej

$$m_{Dix} = -10,06 R v^* \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}. \quad (7.45)$$

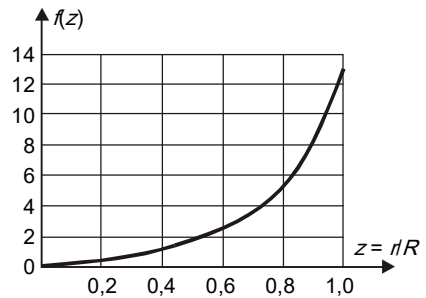
Zależność ta pozwala zdefiniować *współczynnik dyspersji podłużnej* w ruchu turbulentnym

$$K_{TL} = 10,06 R v^*. \quad (7.46)$$

Analogicznie do (7.39), warto porównać ten współczynnik ze współczynnikiem burzliwej dyfuzji D_{TL} według (6.67). W rozważanym przypadku G. I. Taylor otrzymał [162]

$$D_{TL} = 0,052 R v^*. \quad (7.47)$$

Jak widać, iloraz K_{TL}/D_{TL} jest równy 193. Tak więc intensywność dyspersji jest o dwa rzędy większa od intensywności dyfuzji burzliwej. Jest to różnica ogromna, lecz nieporównywalna z dysproporcją (7.40). Relacje opisujące K_{TL} i D_{TL} mają jednakową strukturę, toteż G. I. Tay-



Rys. 7.8. Pomocnicza funkcja $f(z)$, określająca profil prędkości w rurze kołowej wg (7.42)

lor wprowadził efektywny współczynnik dyspersji podłużnej K_L , który dla ruchu burzliwego w rurze kołowej ma postać

$$K_L = K_{TL} + D_{TL} = 10,1 R \nu^* \quad (7.48)$$

7.2.2.3. Prawo Ficka dla dyspersji podłużnej. Jak wynika z formuł (7.36) i (7.45), jednostkowy dyspersyjny strumień masy może być wyrażony za pomocą uogólnionego prawa Ficka, zgodnie z którym

$$m_{DL} = -K_L \frac{\partial \tilde{c}}{\partial L}, \quad (7.49)$$

przy czym kierunek L najczęściej utożsamiamy z kierunkiem osi $0x$.

Jednakże przedstawione wyżej rozumowanie G. I. Taylora nie stanowi wystarczającego uzasadnienia dla zaliczenia dyspersji do zjawisk typu dyfuzyjnego. Rozstrzygające znaczenie ma tu zachowanie się rozkładu stężenia rozważanej substancji. Jeżeli jest ono opisane krzywą typu Gaussa, to dany proces mieszania ma charakter dyfuzyjny. Analiza tego problemu dla przypadku transportu turbulentnego (par. 6.2.2) pozwoliła na wyprowadzenie relacji (6.46) oraz jej praktycznej wersji (6.49), określającej warunek stosowalności prawa Ficka do opisu dyfuzji turbulentnej. Należy tu rozważyć dwa czynniki: zależność wariancji rozkładu stężenia od czasu oraz *skośność* rozkładu stężenia [168].

Pojęcie skośności dotyczy symetrii rozkładu. Jest ona równa zero gdy wykres danej funkcji jest symetryczny. W przeciwnym razie jest różna od zera. Zauważmy, że rozkład typu Gaussa, opisany w naszym przypadku wyrażeniem (4.340), wykazuje symetrię (czyli zerową skośność) tylko względem zmiennej x . Jest on natomiast skośny względem czasu t . Wynika to z faktu, że jeżeli obserwujemy „falę” stężenia substancji rozproszonej (lub temperaturę) w danym przekroju strumienia, to najpierw odnotujemy jego wartość w początkowym („wznoszącym się”) odcinku tej funkcji, a dopiero po upływie pewnego czasu – stężenie na odcinku „opadającym”. Nawet jeśli początkowy rozkład tego stężenia był symetryczny, to wspomniany wyżej wpływ czasu obniży stężenie rejestrowane później, w stosunku do stężenia rejestrowanego wcześniej. W efekcie rozkład $\tilde{c}(x_o, t)$ jest asymetryczny.

Uwaga powyższa ma duże znaczenie praktyczne. Jeśli bowiem pragniemy ocenić przydatność wyników pomiarów stężenia lub temperatury do weryfikacji równań dyspersji, to musimy dysponować rozkładem stężenia wzdłuż strumienia, dla ustalonego czasu, czyli funkcją $\tilde{c}(x, t_o)$. Jej uzyskanie jest bardziej kłopotliwe i kosztowne, niż wyznaczenie funkcji $\tilde{c}(x_o, t)$. Ta pierwsza wymaga bowiem zainstalowania w układzie kilku przyrządów pomiarowych (lub jednoczesnego poboru próbek w kilku miejscach), podczas gdy drugą zmierzimy tylko jednym takim przyrządem.

Wracając do istoty rzeczy, możemy stwierdzić, że model dyspersyjny można stosować wtedy, gdy:

- 1) wariancja stężenia jest liniową funkcją czasu (patrz (6.45));
- 2) przestrzenny rozkład stężenia w ustalonym czasie, czyli funkcja $\tilde{c}(x, t_o)$, jest symetryczna.

Jak wykazują badania (np. [37, 110, 163]), oba te warunki można uznać za spełnione dopiero po przebyciu przez roztwór pewnego dystansu L_A , który wyznacza *podstrefę adwekcyjną* w strefie dyspersji podłużnej (rys. 7.4). Model dyspersyjny może być ściśle stosowany dopiero po przebyciu przez płyn dystansu rzędu 2,5 L_A (a według niektórych badaczy – nawet 10 L_A). Wartość L_A dla rury, wyznaczona przez G. I. Taylora, dana jest wzorem

$$L_A = 0,07 \frac{u_m R^2}{K_T}. \quad (7.50)$$

Symbol K_T oznacza tu *współczynnik dyspersji poprzecznej* (patrz par. 7.3.2).

Dla bardziej nas interesującego przypadku migracji zanieczyszczeń w rzekach, H. B. Fisher [37] proponuje formułę

$$L_A = 0,3 \frac{v l_{CH}^2}{K_T}, \quad (7.51)$$

gdzie l_{CH} oznacza charakterystyczny dystans poprzeczny. Jest on równy odległości między nurtem rzeki a jej dalszym brzegiem. Dla kanałów symetrycznych $l_{CH} = b/2$ (b – szerokość rzeki), zaś dla rzek rzeczynistych należy przyjmować $l_{CH} = 0,7b$.

Z kolei według pracy [16] model dyspersyjny można stosować wtedy, gdy od momentu emisji upłyne czas

$$t_{CH} = 0,5 h^2/K_T. \quad (7.52)$$

Tak więc w ścisłym ujęciu, w podstrefie adwekcyjnej nie wolno stosować prawa Ficka w wersji (7.49). Niektórzy badacze proponują tu *nieliniowe prawo Ficka*, zgodnie z którym [110]

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} = K_{L1} \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial x^2} + K_{L2} \frac{\partial^3 \tilde{c}}{\partial x^3} + K_{L3} \frac{\partial^4 \tilde{c}}{\partial x^4} + \dots \quad (7.53)$$

Jednakże nie jest to model, którego poziom rozwoju umożliwia stosowanie. W praktyce więc, mając świadomość omówionych wyżej ograniczeń, stosujemy jednak relację (7.49) od samego początku strefy dyspersji podłużnej, pamiętając o tym, że w podstrefie adwekcyjnej nie można oczekiwać dużej zgodności wyników obliczeń z rezultatami ewentualnie przeprowadzonych pomiarów. Na szczęście jednak, w praktyce długość pola dalekiego jest na tyle duża, że niedokładność ta może być pominięta.

7.2.2.4. Współczynnik dyspersji podłużnej. Omówione w poprzednich punktach współczynniki dyspersji odnosiły się do zamkniętych przewodów kołowych. Przedstawiliśmy je jednak ze względów metodycznych. Przy rozważaniu problemów migracji zanieczyszczeń w środowisku naturalnym, bardziej interesują nas przepływy w rzekach, kanałach, czy rowach otwartych. Za podstawową relację, określającą współczynnik dyspersji dla tego typu układów, należy uznać wzór Eldera [37], zgodnie z którym

$$K_L = 5,93 h v^*. \quad (7.54)$$

Jest to wartość efektywna, to znaczy uwzględnia ona także wpływ dyfuzji turbulentnej i molekularnej (który jest niewielki, rzędu 1%, co widać z porównania wzorów (6.67) i (7.54)).

Stały mnożnik w ostatnim wzorze należy potraktować z pewną ostrożnością. Jest on cytowany w literaturze jako wartość klasyczna, dla prostych koryt otwartych o dużej szerokości (to jest takiej, dla której można pominąć wpływ brzegów na profil prędkości). Często wartość tego mnożnika bywa wyznaczana lokalnie, dla badanego ciekłu, na podstawie wyników specjalnie przeprowadzonych pomiarów. Istnieje ogromna liczba publikacji na ten temat (ich przegląd – np. [51, 110]), prezentujących konkretne przypadki techniczne. Wykazują one ogromny rozrzut wartości tego mnożnika, bowiem

$$30 < \frac{K_L}{h v^*} < 3000, \quad (7.55)$$

co zdecydowanie przekracza wartość 5,93 w (7.54). Mniejszą rozbieżność otrzymuje się po odniesieniu wartości K_L do szerokości rzeki b (zamiast do jej głębokości średniej h), gdyż wtedy

$$2 < \frac{K_L}{bv^*} < 50. \quad (7.56)$$

Metoda identyfikacji mnożnika we wzorze opisującym K_L (przy akceptacji struktury tego wzoru, jak w relacji (7.54)) jest o tyle atrakcyjna, że pozwala na wyznaczenie wartości współczynnika transportu dla konkretnego rozważanego przypadku. Jednakże ma też dość istotne wady: jest kosztowna i czasochłonna (wymaga przeprowadzenia pomiarów w naturze), a wyznaczona wartość współczynnika jest obciążona błędami i pomyłkami, które można popełnić w trakcie pomiarów. Ponadto wartość ta może ujmować także inne efekty, niekoniecznie związane z samą dyspersją (na przykład, często w hydraulice koryt otwartych posługujemy się uśrednionym spadkiem dna; w takim przypadku zmiany prędkości średniej, wynikające z rzeczywistych zmian spadku, mogą być wspólnie zaliczone do efektów dyspersyjnych). Być może te właśnie czynniki są powodem tak dużej rozbieżności w relacji (7.55).

Wzór (7.54), przy wyżej omówionym rozrzucie wartości występującego w nim stałego mnożnika, ma typową strukturę, szeroko przyjętą w teorii dyspersji. Jednakże w literaturze zagadnienia znaleźć można wiele innych zależności, określających wartość K_L . Z reguły mają one charakter empiryczny. Poniżej zestawiono niektóre z nich [22, 37, 110, 125]:

$$K_L = 0,058 \frac{Q}{i_0 b} \quad (\text{McQuivey i Keefer}), \quad (7.57)$$

$$K_L = 0,008 \frac{v^2 b^2}{K_T} \quad (\text{Fisher i Jain}), \quad (7.58)$$

$$K_L = 0,18 \left(\frac{v^*}{v} \right) \frac{Q^2}{v^* R_h^3} \quad (\text{Lin}), \quad (7.59)$$

$$K_L = 20,2 R_h v \sqrt{g} / C_{CH} \quad (\text{Parker}), \quad (7.60)$$

$$K_L = 7,25 h v^* \left(\frac{v}{v^*} \right)^{1/4} \quad (\text{Thackston}), \quad (7.61)$$

$$K_L = 0,8 \exp(0,34 v \sqrt{A}) \quad (\text{Patterson i Gloyna}). \quad (7.62)$$

W tej ostatniej zależności należy podstawić prędkość w [m/s], a pole powierzchni przekroju poprzecznego rzeki w [m²]. Współczynnik K_L ma wtedy wymiar [m²/s].

7.2.3. Równanie nieustalonej adwekcji-dyspersji – przypadek jednowymiarowy

Podstawiając równanie konstytutywne (7.49) do uśrednionego względem przekroju poprzecznego strumienia równania zachowania masy substancji rozpuszczonej (7.25), otrzymujemy następującą relację:

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} = \frac{1}{S} \frac{\partial}{\partial x} \left(K_L S \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} \right) + \tilde{Z}. \quad (7.63)$$

Jest to podstawowe równanie, opisujące nieustaloną *dyspersję podłużną*, z uwzględnieniem działania źródeł. Współczynnik K_L jest tu wielkością efektywną, czyli uwzględnia też efekty dyfuzyjne. Dla pola uśrednionej temperatury mamy zależność (formalnie identyczną z poprzednią), którą otrzymujemy z (7.26) i (7.49), czyli

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} = \frac{1}{S} \frac{\partial}{\partial x} \left(K_L S \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} \right) + \tilde{q}_{es}. \quad (7.64)$$

W powyższych wersjach przyjęliśmy, że charakterystyka geometryczna oraz prędkość cieczy w korycie otwartym mogą się zmieniać w czasie oraz/lub wzdłuż koryta. Jednakże często możemy przyjąć (przynajmniej w technicznym przybliżeniu), że wielkości te są stałe, skutkiem czego stały jest również współczynnik dyspersji podłużnej K_L . Możemy wtedy napisać

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} + v \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} = K_L \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial x^2} + \tilde{Z}, \quad (7.65)$$

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} = K_L \frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial x^2} + \tilde{q}_{es}. \quad (7.66)$$

7.2.4. Formułowanie zagadnień praktycznych

Z formalnego punktu widzenia równania (7.65) i (7.66) są identyczne z równaniami zachowania masy i energii w wersji pełnej, odpowiadającej adwekcji rzeczywistej oraz molekularnemu transportowi względnemu. Z tego powodu wszystkie uwagi odnośnie do sposobów poprawnego formułowania zagadnień, które można opisywać tymi równaniami, pozostają w mocy także tutaj (podrozdz. 4.11).

Zwróćmy więc tylko uwagę na pewne kwestie szczegółowe, dotyczące określania obszaru określoności rozwiązania. Obszar, w którym poszukujemy rozwiązania, jest tu *odcinkiem* (jego brzeg jest wtedy określony przez dwa punkty – początkowy i końcowy, jak na rys. 4.27c), *półprostą* (jeden z punktów brzegowych dąży wtedy do nieskończoności) lub *prostą* (oba punkty brzegowe usytuowane są w nieskończoności).

Warunkiem stosowania omawianego tu modelu jest wysoki stopień wyrównania stężenia substancji rozpuszczonej oraz/lub temperatury płynu w przekroju poprzecznym strumienia. I w istocie rzeczy to właśnie model dyspersyjny jest najbardziej typowy dla przepływów jednowymiarowych. Procesy dyfuzyjne (molekularny i turbulentny) cechuje bowiem zróżnicowanie przestrzenne i tylko w bardzo szczególnych sytuacjach mogą one być opisane tak prostymi modelami.

Formalnie rzecz biorąc, model dyspersji podłużnej można stosować zawsze, lecz uzyskane wyniki tym lepiej oddają rzeczywistość, im dokładniej spełnione są założenia tego modelu. W szczególności chodzi tu o przeprowadzenie analizy długości *pola bliskiego* (rys. 6.16 i 7.4).

Duże znaczenie ma sposób wprowadzenia zanieczyszczeń do odbiornika. Jeżeli odbywa się to poprzez strumień o niewielkiej miąższości i znacznej prędkości, wtedy w rejonie wylotu kształtuje się strefa strumienia, przechodząca w strefę dyfuzji przestrzennej, a następnie w strefę dyspersji płaskiej. Ale przez odpowiednie ukształtowanie wylotu możemy niekiedy zredukować pole bliskie niemal całkowicie. Możliwe są też sytuacje pośrednie.

Jeżeli długość pola bliskiego L_{MH} (par. 6.5.3) jest istotna w naszych rozważaniach, wtedy do opisu zjawiska w jego obrębie musimy użyć równań dokładnych (rozdz. 4 i 6).

Jeżeli jednak długość tego pola jest pomijalna w porównaniu z długością całego rozważanego obszaru, wtedy możemy usytuować początek osi $0x$ układu współrzędnych w odległości L_{MH} od wylotu i posługiwać się tylko równaniami dyspersji (masy oraz/lub energii). Zawsze należy też sprawdzić, czy warunki (7.51) i (7.52) są spełnione. Choć bowiem w praktyce i tak z reguły będziemy posługiwali się modelami jednowymiarowymi, to informacja ta będzie potrzebna przy ocenie dokładności uzyskanego rozwiązania.

Trzeci element zagadnienia, warunki początkowe i brzegowe, formułuje się tu zgodnie z zasadami ogólnymi (par. 4.11.3 i 4.11.4).

7.2.5. Rozwiązywanie zagadnień praktycznych

W mocy pozostają tu wszystkie metody rozwiązywania zagadnień, omówione już dla równania adwekcji-dyfuzji (podrozdz. 4.12). Bardzo pożyteczne mogą być przedstawione tam analityczne rozwiązania dla przypadków jednowymiarowych (które w istocie rzeczy bardziej odpowiadają warunkom dyspersji, niż dyfuzji). W praktyce natomiast, gdy warunki dynamiczne ulegają zmianom wzdłuż rzeki oraz ewentualnie także w czasie, powszechnie stosujemy metody numeryczne (par. 4.12.4).

Przykład 7.1

Wskutek awarii zbiornika, służącego do magazynowania zużytych kąpielii w zakładzie prowadzącym chromowe garbowanie skór, do koryta pobliskiej rzeki przedostało się $V = 50 \text{ m}^3$ ścieków. Ich charakterystycznym składnikiem są związki chromu, o łącznym stężeniu $c_s = 2,6 \text{ kg/m}^3$. Średnia szerokość tej rzeki wynosi $B = 8,0 \text{ m}$, a jej średnia głębokość i prędkość w czasie awarii wynosiły odpowiednio $h = 2,0 \text{ m}$ i $v = 0,40 \text{ m/s}$. W odległości $L = 2,0 \text{ km}$ od miejsca wprowadzenia ścieków (które dzięki ukształtowaniu wylotu uległy szybkiemu wymieszaniu w przekroju poprzecznym rzeki) znajduje się ujście wody do celów rolniczych. Określić czas trwania zagrożenia rejonu tego ujścia przez związki chromu, pochodzące z garbarni.

Rozwiązanie

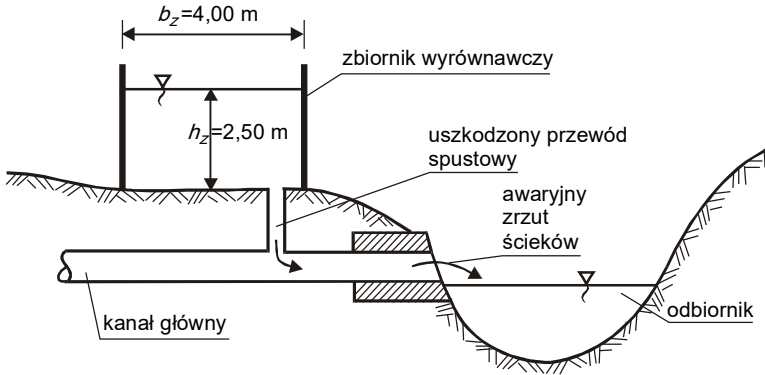
Podana wyżej treść przykładowego zadania nie zawiera pełnego zestawu informacji, pozwalających na jego rozwiązanie. Stanowi to pretekst do uwypuklenia potrzeby starannego kompletowania danych początkowych. Potrzebna jest tu współpraca między stroną zamawiającą ekspertyzę, a jej wykonawcą. Często należy przeprowadzać wizje lokalne, pomiary terenowe, analizy danych archiwalnych.

Przyjmijmy więc, że (po zgromadzeniu niezbędnych informacji dodatkowych) można awaryjny zrzut ścieków potraktować jako nieustalony wypływ zawartości uszkodzonego zbiornika do rzeki, który pod względem intensywności może być opisany relacjami odpowiadającymi wypływowi przez otwór w dnie (rys. 7.9). Przy takim schemacie, czas wypływu ścieków obliczamy ze wzoru [101]

$$t_z = \frac{A_z \sqrt{h_z}}{\mu A_o \sqrt{2g}}. \quad (7.67)$$

Pole powierzchni zbiornika w planie wynosi $A_z = l_z h_z = 20,0 \text{ m}^2$, zaś powierzchnia otworu odpływowego $A_o = 0,0314 \text{ m}^2$. Współczynnik wydatku niech wynosi $\mu_o = 0,5$. Obliczeniowy czas wypływu jest więc równy

$$t_z = 455 \text{ sekund.}$$



Rys. 7.9. Awaryjny zrzut ścieków przemysłowych (przykład 7.1)

Początkowy wydatek ścieków wynosi

$$Q_P = \mu_0 A_0 \sqrt{2gh_Z} = 0,11 \text{ m}^3/\text{s}, \quad (7.68)$$

jest więc bardzo mały w porównaniu z wydatkiem odbiornika, równym $Q_O = B h_O v = 6,40 \text{ m}^3/\text{s}$. Pozwala nam to na pominięciu wpływu zrzutu na dynamikę rzeki. Korzystając z relacji (6.147), możemy obliczyć początkowe stężenie związków chromu w rzece w miejscu zrzutu (przyjęto, że związki te nie występują w czystej wodzie odbiornika). Jest ono równe

$$c_O(t) = c_s Q_s(t) / [Q_O + Q_s(t)],$$

gdzie wydatek ścieków obliczamy ze wzorów (7.67) i (7.68). Wyznaczona z ostatniej relacji funkcja $c_O(t)$ posłuży nam jako warunek brzegowy dla $x = 0$ (rys. 7.10).

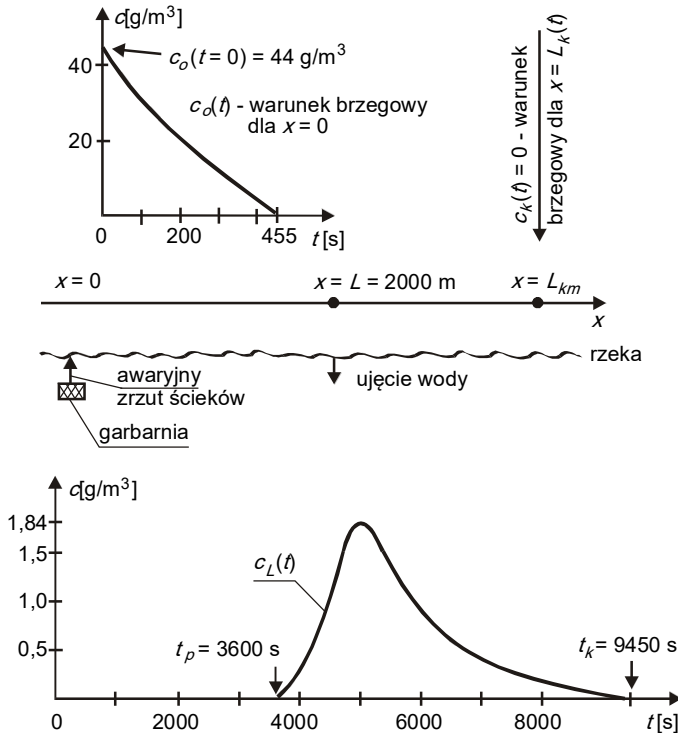
Przechodząc do następnego etapu rozwiązywania problemu, podkreślmy raz jeszcze znaczenie ścisłości uprzednio przygotowanych danych wejściowych. Jest to tym bardziej istotne, że sam proces rozwiązywania odpowiednich równań jest w dużym stopniu zautomatyzowany, najczęściej poprzez stosowanie komercyjnego oprogramowania komputerowego. Im dokładniej opiszemy matematycznie warunki, w jakich przebiega rozważane zjawisko, tym dokładniej uzyskane wyniki odtworzą sam jego przebieg.

Naszym celem jest określenie rozkładu stężenia związków chromu $c_L(t)$ w przekroju $x = L$. Gdyby prawy brzeg obszaru usytuować w tym właśnie punkcie, wtedy mielibyśmy trudności ze sformułowaniem odpowiedniego warunku brzegowego. Wartość szukanej funkcji dla $x = L$ (mogąca służyć jako dogodny warunek Dirichleta – pkt 4.11.4.2) jest tu bowiem poszukiwaną niewiadomą. Możemy co prawda zastosować tu uproszczony warunek Neumanna (4.276), lecz obniżyłoby to dokładność wyznaczenia $c_L(t)$. Wykorzystajmy więc tu *metodę uciekającego brzegu*, definiując aktualną długość obliczeniowego odcinka rzeki $L_K(t)$ jako $L_K(t = 0)$ oraz $L_K(t = t_{\max}) = L_{KM}$ (rys. 7.10). Na tak zdefiniowanym brzegu prawym jako warunek brzegowy przyjmujemy

$$c_K = c(x = L_K, t) = 0.$$

Tak sformułowane zadanie (równanie (7.59) z wyżej omówionymi warunkami brzegowymi) rozwiązano numerycznie, metodą różnic skończonych. Współczynnik dyspersji podłużnej K_L obliczono ze wzoru (7.54), otrzymując wartość $0,02 \text{ m}^2/\text{s}$ (dla współczynnika Manninga $n_M = 0,016$ prędkość dynamiczna wynosi tu $v^* = 0,0017 \text{ m/s}$). Przebieg funkcji

$c_L(t)$ otrzymanej w wyniku obliczeń pokazano na rys. 7.10. Jak widać tam, proces dyspersji w istotny sposób deformuje początkowy rozkład stężenia, redukując jego maksymalną wartość od $c_0 = 44,0 \text{ g/m}^3$ w przekroju zrzutu do $c_{LM} = 1,84 \text{ g/m}^3$ w przekroju $x = L$. Pierwsze porcje zanieczyszczonej wody dopływają do rejonu ujęcia po upływie 1 godziny, zaś odpływ tej wody trwa ponad 2,5 godziny.



Rys. 7.10. Schemat obliczeniowy do przykładu 7.1 □

7.3. Ilościowy opis dyspersji w płaszczyźnie poziomej

7.3.1. Przekształcenie równań zachowania masy i energii

Płaska dyspersja masy oraz/lub energii pojawia się wtedy, gdy:

- 1) rozkład stężenia substancji rozpuszczonej oraz/lub temperatury płynu wzdłuż jednej ze zmiennych przestrzennych (w tym przypadku: względem głębokości warstwy cieczy) staje się na tyle wyrównany, że możemy zastąpić go jedną wartością średnią względem tej zmiennej (rys. 7.4, obszar między $x = L_{MVC}$ oraz $x = L_{MHC}$);
- 2) profil prędkości płynu wzdłuż tej zmiennej także postanawiamy uśrednić.

Szczegółową charakterystykę tego procesu przedstawiliśmy w par. 7.1.3, toteż tutaj powtórzmy jedynie, że *dyspersja płaska jest pojęciem zastępczym, opisującym* (za pomocą członów typu dyfuzyjnego) *wpływ odrzuconych składowych uśrednionego profilu prędkości na proces transportu masy oraz/lub energii.*

Wprowadzamy tu następującą dekompozycję wektora prędkości $\bar{\mathbf{u}}$, stężenia \bar{c} oraz temperatury \bar{T} (zmiennie te zostały uprzednio uśrednione względem czasu, dla oddzielenia turbulentnych fluktuacji):

$$\bar{\mathbf{u}}(x, y, z, t) = \mathbf{u}(x, y, z, t) + \mathbf{u}^+(x, y, z, t), \quad (7.69)$$

$$\bar{c}(x, y, z, t) = \tilde{c}(x, y, t) + c^+(x, y, z, t), \quad (7.70)$$

$$\bar{T}(x, y, z, t) = \tilde{T}(x, y, t) + T^+(x, y, z, t). \quad (7.71)$$

Przyjmujemy układ współrzędnych jak na rys. 7.2 i uśredniamy obie strony równania (6.108), całkując je względem zmiennej z . Mamy

$$\frac{1}{H} \int_{Z_d(x,y,t)}^{Z_g(x,y,t)} \left[\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \text{div}(\bar{\mathbf{u}}\bar{c}) \right] dz = \frac{1}{M} \int_{Z_d(x,y,t)}^{Z_g(x,y,t)} [\text{div}\{D_M + D_T\}\nabla\bar{c} + \bar{Z}] dz. \quad (7.72)$$

Następnie wykonujemy wszelkie możliwe przekształcenia powyższej zależności, formalnie w sposób identyczny z opisanym w par. 7.2.1. Wykorzystujemy tu twierdzenie o różniczkowaniu pod znakiem całki (7.14), wraz z jego szczególną wersją (7.15), warunki kinematyczne (7.16) i (7.17) oraz oszacowanie (7.18). Po wykonaniu tych przekształceń otrzymamy następujące równanie:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\tilde{c}H)}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{c}v_x H)}{\partial x} + \frac{\partial(\tilde{c}v_y H)}{\partial y} &= \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial x} \left[\overline{H(D_M + D_T) \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}} \right] + \\ &+ \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial y} \left[\overline{H(D_M + D_T) \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}} \right] + \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial x} \left(-\overline{c^+ u_x^+ H} \right) + \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial y} \left(-\overline{c^+ u_y^+ H} \right) + \tilde{Z}. \end{aligned} \quad (7.73)$$

Interpretacja dodatkowych członów

$$m_{Dx} = \overline{c^+ u_x^+}, \quad m_{Dy} = \overline{c^+ u_y^+}, \quad (7.74)$$

które się pojawiły, wynika z analogicznego rozumowania, jak dla przypadku jednowymiarowego (par. 7.2.1) – opisują one składowe *jednostkowego dyspersyjnego strumienia masy* (czyli strumienia masy przenoszonego przez odchyłkę prędkości \mathbf{u}^+).

Z kolei równanie transportu energii cieplnej (6.121), po wykonaniu identycznych przekształceń, przyjmie następującą postać:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\tilde{T}H)}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{T}v_x H)}{\partial x} + \frac{\partial(\tilde{T}v_y H)}{\partial y} &= \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial x} \left[\overline{H(D_M + D_T) \frac{\partial \bar{T}}{\partial x}} \right] + \\ &+ \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial y} \left[\overline{H(D_M + D_T) \frac{\partial \bar{T}}{\partial y}} \right] + \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial x} \left(-\overline{T^+ u_x^+ H} \right) + \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial y} \left(-\overline{T^+ u_y^+ H} \right) + \tilde{q}_{es}. \end{aligned} \quad (7.75)$$

Opisuje ono zmiany temperatury w czasie, powodowane strumieniami energii cieplnej: przenoszonym z prędkością średnią, przenoszonym przez fluktuacje prędkości (turbulentne przewodzenie ciepła) i przenoszonym przez odchyłkę prędkości (dyspersja ciepła) oraz związane z dostarczaniem lub pobieraniem ciepła w trakcie procesów źródłowych.

7.3.2. Prawo Ficka dla dyspersji płaskiej

7.3.2.1. Anizotropia procesu. Możliwość opisu płaskich dyspersyjnych strumieni masy oraz energii cieplnej za pomocą uogólnionego prawa Ficka jest przyjmowana na zasadzie generalizacji rozumowania, przeprowadzonego dla przypadku jednowymiarowego (par. 7.2.2). Zarówno analiza teoretyczna, jak i wyniki pomiarów (w laboratoriach i w warunkach naturalnych) pokazują, że w ruchu płaskim dyspersja ma charakter *anizotropowy*, toteż prawo Ficka zapisujemy następująco:

$$\mathbf{m}_D(x, y, t) = \overset{\sim}{c^+} \mathbf{u}^+ = -[K] \text{grad } \tilde{c}(x, y, t). \quad (7.76)$$

Charakterystycznymi kierunkami są tu kierunek wyznaczony przez wektor prędkości \mathbf{u} (*dyspersja podłużna*) oraz przez kierunek poziomy, prostopadły do tego wektora (*dyspersja poprzeczna*).

Znaczenie anizotropii i jej wpływ na przebieg procesu migracji zanieczyszczeń omówiliśmy w odniesieniu do dyfuzji burzliwej (pkt 6.2.3.2, rys. 6.6 i 6.7). Sformułowane tam wnioski odnoszą się także do przebiegu dyspersji, bowiem $K_L \gg D_T$ (pkt 7.2.2.4).

7.3.2.2. Przypadek przepływu jednokierunkowego. Gdy wektor prędkości ma tylko jedną niezerową składową v_x (przepływ jednokierunkowy), wtedy oś $0x$ oraz prostopadła do niej oś $0y$ są równoznaczne z *osiąmi głównymi* procesu dyspersji. Prawo Ficka możemy wtedy zapisać w następującej postaci macierzowej:

$$\begin{bmatrix} m_{Dx} \\ m_{Dy} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} K_L & 0 \\ 0 & K_T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} \\ \frac{\partial \tilde{c}}{\partial y} \end{bmatrix}. \quad (7.77)$$

Uwzględniono tu omówioną już (pkt 7.2.2.4) przewagę intensywności dyspersji nad dyfuzją burzliwą, toteż współczynniki K_L i K_T mają charakter wielkości efektywnych (uwzględniono w nich współczynniki D_{TL} oraz D_{TH} , zgodnie z (7.48)).

7.3.2.3. Współczynniki dyspersji. Sposób wyznaczania współczynnika K_L , dla kierunku wyznaczonego przez wektor prędkości, przedstawiono w punkcie 7.2.2.4. Pozostaje więc omówienie *współczynnika dyspersji poprzecznej* K_T . Dla interesujących nas tu przepływów ze swobodną powierzchnią, opisywany jest on wzorem o strukturze identycznej z zależnością (7.54). Dla kanałów prostych stały mnożnik w takim wzorze waha się według różnych badaczy w granicach [110]

$$0,15 < \frac{K_T}{h\nu^*} < 0,30, \quad (7.78)$$

bez porównania węższych, niż w przypadku K_L (7.55). Jako podstawową możemy tu przyjąć relację Eldera [37], postaci

$$K_T = 0,23 h \nu^*. \quad (7.79)$$

Dla rzek lekko meandrujących mamy

$$0,30 < \frac{K_T}{h\nu^*} < 0,90, \quad (7.80)$$

zaś w korytach wyraźnie zakrzywionych

$$1,0 < \frac{K_T}{h\nu^*} < 3,0. \quad (7.81)$$

Dla takich kanałów (o promieniu krzywizny dla osi oznaczonym jako r_{ck}) i kołowym przekroju poprzecznym mamy według [37] wzór

$$\frac{K_T}{h\nu^*} = 1,56 \left(\frac{\nu_x h}{\nu^* r_{ck}} \right)^2 \quad (7.82)$$

zamiast relacji (7.79). Z kolei dla większych rzek naturalnych Sayre [110] podaje zależność

$$\frac{K_T}{h\nu^*} = A \left(\frac{\nu_x b}{\nu^* r_{ck}} \right)^2, \quad (7.83)$$

gdzie mnożnik A maleje od 0,9 do 0,3, gdy wydatek rośnie od 565 m³/s do 1700 m³/s.

7.3.2.4. Przypadek ogólny. Gdy wektor prędkości uśrednionej w pionie zmienia się w płaszczyźnie $x0y$, wtedy współczynnik dyspersji $[K]$ ma cztery składowe i prawo Ficka (7.76) w zapisie macierzowym ma postać następującą:

$$\begin{bmatrix} m_{Dx} \\ m_{Dy} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} \\ K_{yx} & K_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} \\ \frac{\partial \tilde{c}}{\partial y} \end{bmatrix}. \quad (7.84)$$

Korzystając z omówionych już *twierdzeń o reprezentacji* [170], możemy znaleźć związek między współczynnikami K_L oraz K_T , wyznaczonymi dla układu osi głównych, a ich ogólnymi postaciami w (7.84). Odpowiednie przekształcenie zostało omówione (dla przypadku trójwymiarowego) w punkcie 6.2.3.4, toteż tutaj podamy tylko końcowe postacie odpowiednich relacji (patrz też (6.62)), które wyglądają następująco:

$$\left. \begin{aligned} K_{xx} &= K_L n_{pix}^2 + K_T n_{piy}^2 \\ K_{xy} &= K_{yx} = (K_L - K_T) n_{pix} n_{piy} \\ K_{yy} &= K_L n_{piy}^2 + K_T n_{pix}^2 \end{aligned} \right\}. \quad (7.85)$$

Składowe wektora kierunkowego \mathbf{n}_{pi} określają relacje

$$n_{pix} = \nu_x / |\mathbf{v}|, \quad n_{piy} = \nu_y / |\mathbf{v}|. \quad (7.86)$$

7.3.3. Robocze postacie równania dyspersji płaskiej

Podstawiając równanie konstytutywne (7.77) do równania zachowania masy (7.73), otrzymamy dla rozważanej tu klasy zagadnień następujące równanie transportu:

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} + \nu_x \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} = \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial x} \left(K_L h \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} \right) + \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial y} \left(K_T h \frac{\partial \tilde{c}}{\partial y} \right) + \tilde{Z}. \quad (7.87)$$

Człon adwekcyjny uproszczono, korzystając z równania zachowania masy roztworu (7.22).

Może ono być stosowane tylko do opisu dyspersji w przepływach dwuwymiarowych, lecz jednokierunkowych. Typowym przykładem jest tu migracja zanieczyszczeń w strefie dyspersji płaskiej w rzece (rys. 7.4).

W sytuacjach bardziej ogólnych podstawiamy (7.84) do (7.73). Pole prędkości dla takiego przepływu często wyznacza się z ogólnych równań de Saint-Venanta [134, 157], postaci

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hv_x)}{\partial x} + \frac{\partial(hv_y)}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} + g\nabla h &= g(\mathbf{i} - \mathbf{i}_f), \end{aligned} \right\} \quad (7.88)$$

gdzie *spadek hydrauliczny* \mathbf{i}_f wyznacza się z wektorowo zapisanej relacji (7.24)

$$\mathbf{i}_f = \frac{|\mathbf{v}|\mathbf{v}}{C_{CH}^2 h}. \quad (7.89)$$

Wykorzystując (7.88) możemy uprościć człon adwekcyjny w (7.73), a po podstawieniu (7.84) otrzymamy następujące *równanie płaskiej dyspersji masy*:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} + v_x \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} + v_y \frac{\partial \tilde{c}}{\partial y} &= \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} h \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} + K_{xy} h \frac{\partial \tilde{c}}{\partial y} \right) + \\ &+ \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yx} h \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} + K_{yy} h \frac{\partial \tilde{c}}{\partial y} \right) + \tilde{Z}. \end{aligned} \quad (7.90)$$

Współczynniki dyspersji obliczamy z zależności (7.85), uprzednio wyznaczwszy K_L i K_T , najczęściej ze wzorów (7.54) i (7.79).

Równanie opisujące dyspersję energii cieplnej otrzymujemy w sposób identyczny jak poprzednie, podstawiając omówione już zależności do (7.75). Dla przepływu jednokierunkowego i dwuwymiarowego otrzymujemy wtedy

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + v_x \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} = \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial x} \left(K_L h \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} \right) + \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial y} \left(K_T h \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} \right) + \bar{q}_{es}. \quad (7.91)$$

Dla przypadku dwukierunkowego, gdy $\mathbf{v} = [v_x, v_y]$, mamy

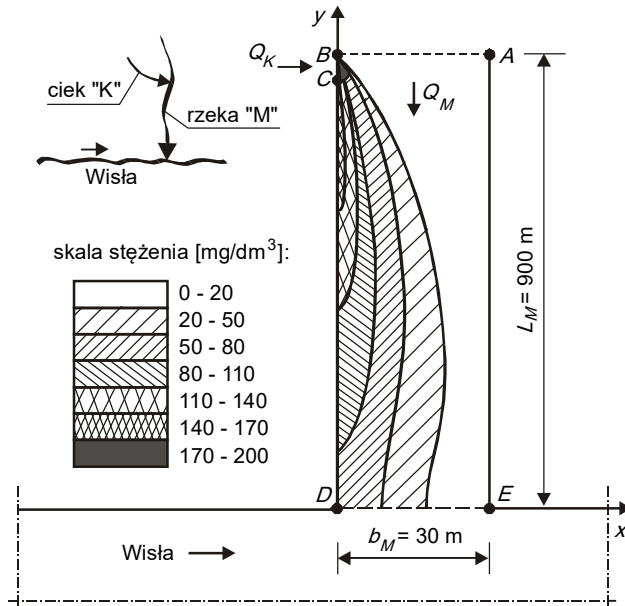
$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + v_x \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} + v_y \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} &= \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} h \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} + K_{xy} h \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} \right) + \\ &+ \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yx} h \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} + K_{yy} h \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} \right) + \bar{q}_{es}. \end{aligned} \quad (7.92)$$

7.3.4. Formułowanie i rozwiązywanie zagadnień praktycznych

Zasady ogólne są tu identyczne ze sposobami postępowania, omówionymi już w podrozdziałach 4.11 i 4.12, z uwzględnieniem zastrzeżeń dotyczących oddzielania *strefy dyspersji* od *strefy dyfuzji*, podanymi w par. 7.2.4.

Przykład 7.2

Do rzeki M, w odległości $L_M = 900$ m powyżej jej ujścia do Wisły, wpływają zanieczyszczone wody lokalnego cieków K (rys. 7.11). Wyznaczyć rozkład stężenia substancji organicznej w rzece M, między dopływem a ujściem. Szerokości i głębokości rozważanych cieków wynoszą: $b_M = 30,0$ m, $h_M = 2,5$ m, $b_K = 4,0$ m, $h_K = 2,5$ m. Ich wydatki wynoszą $Q_M = 18,0$ m³/s i $Q_K = 3,0$ m³/s. Dla wody niezanieczyszczonej mamy BZT₅ równe $\tilde{c}_M = 8,0$ mg/l, zaś dla wody zanieczyszczonej – $\tilde{c}_K = 200$ mg/l.



Rys. 7.11. Schemat obliczeniowy i rozwiązanie przykładu 7.2 (skala skażona)

Rozwiązanie

Ze względu na warunki zadania przyjęto, że rozkład stężenia zanieczyszczeń może być traktowany jako ustalony w czasie oraz słabo zmienny względem pionu. Wobec zbliżonych prędkości średnich dla obu cieków ($v_M = (Q_M + Q_K)/b_M h_M = 0,28$ m/s, $v_K = Q_K/b_K h_K = 0,30$ m/s) oraz ich jednakowych głębokości można pominąć strefę strumienia i strefę dyfuzji, a w całym obszarze zastosować model dyspersji płaskiej. Kolejnym uproszczeniem, które można przyjąć ze względu na niewielką długość cieków, jest pominięcie samooczyszczania $\tilde{Z} = 0$. Ostatecznie więc równanie (7.87) przyjmie następującą postać:

$$v_M \frac{\partial \tilde{c}}{\partial y} = K_T \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial x^2} + K_L \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial y^2}.$$

Obszar obliczeniowy potraktowano jako prostokąt o długości L i szerokości b_M (rys. 7.11). Jako warunki brzegowe na brzegach fizycznych AE i CD przyjęto warunek Neumanna

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial n} = 0.$$

Taki sam warunek, lecz tym razem w sensie przybliżonym, zadano na brzegu matematycznym DE. Dla pozostałych odcinków brzegu matematycznego przyjęto odpowiednio $\tilde{c}_{AB} = \tilde{c}_M$ oraz $\tilde{c}_{BC} = \tilde{c}_K$.

Zadanie rozwiązano numerycznie, metodą różnic skończonych. Współczynniki dyspersji obliczono ze wzorów Eldera (7.54) i (7.79). Przyjmując współczynnik Manninga $n_M = 0,016$, otrzymano

$$K_L = 0,242 \text{ m}^2/\text{s}, \quad K_T = 0,009 \text{ m}^2/\text{s}.$$

Obliczone rozkłady stężenia przedstawiono na rys. 7.11 za pomocą izol linii. Jak widać, na całym odcinku L_M kształtuje się strefa dyspersji płaskiej pola bliskiego, a obszar wody zanieczyszczonej nie sięga drugiego brzegu rzeki M. Jest to zrozumiałe, bo zgodnie ze wzorem (6.163) mamy tu $L_C = 2670 \text{ m} > L_M = 900 \text{ m}$ (wartość współczynnika poprzecznej dyfuzji burzliwej wg (6.72) wynosi tu $D_{TH} = 0,0051 \text{ m}^2/\text{s}$). ■

7.4. Dyspersja w płaszczyźnie pionowej

Mechanizm dyspersji dwuwymiarowej, zachodzącej w płaszczyźnie pionowej, jest w istocie rzeczy identyczny z poprzednio omówionym dla płaszczyzny poziomej. Formalnie różnica polega na tym, że zamiast uśredniać prędkość i stężenie oraz temperaturę względem głębokości warstwy cieczy, czynimy to względem jednego z kierunków poziomych. Jest to oczywiście dopuszczalne wtedy, gdy zróżnicowanie prędkości i stężenia oraz/lub temperatury w tym wybranym kierunku jest pomijalnie małe.

Przykładem takiej sytuacji może być tak zwane *selektywne ujęcie wody* ze zbiornika, otworzonego przez konstrukcję piętrzącą (rys. 7.12). Warstwa powierzchniowa oraz denna zmagazynowanej tam wody mają z reguły gorszą jakość, niż woda znajdująca się w środkowych partiach zbiornika. Staramy się więc tak zaprojektować ujęcie (w tym przypadku – w korpusie zapory), aby pobierać tę najlepszą jakościowo wodę.

Dokładny opis pola stężenia wymaga rozwiązania pełnych równań adwekcji-dyfuzji, co jest trudne i kosztowne. Jeśli więc spełnione są warunki poprzecznego uśredniania, wtedy zamiast (7.72) piszemy

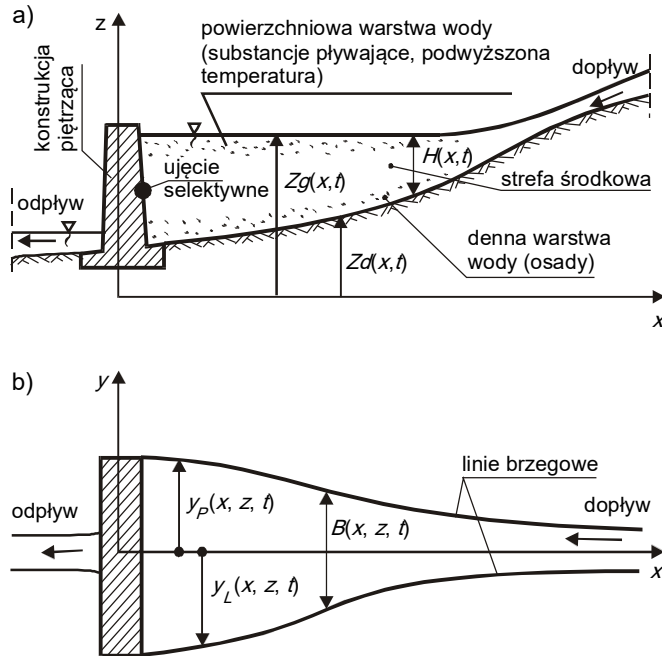
$$\frac{1}{B} \int_{y_L}^{y_P} \left[\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \text{div}(\bar{\mathbf{u}}\bar{c}) \right] dy = \frac{1}{B} \int_{y_L}^{y_P} [\text{div}\{(D_M + D_T)\nabla\bar{c}\} + \bar{Z}] dy. \quad (7.93)$$

Po wykonaniu przekształceń, które szczegółowo omówione zostały w poprzednich podrozdziałach, otrzymujemy następujące równanie transportu masy w płaszczyźnie pionowej:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} + v_x \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} + v_z \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} = \frac{1}{B} \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} B \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} + K_{xz} B \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} \right) + \\ + \frac{1}{B} \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zx} B \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} + K_{zz} B \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} \right) + \tilde{Z}. \end{aligned} \quad (7.94)$$

Zastępując \tilde{c} przez uśrednioną temperaturę \tilde{T} , otrzymamy równanie transportu energii cieplnej dla rozważanego przypadku.

Pole prędkości przepływu wody możemy wyznaczyć z równań uśrednionych w pionie, będących odpowiednikiem układu równań de Saint-Venanta (7.88) dla ruchu w płaszczyźnie poziomej, lub za pomocą modeli równorzędnych [134].



Rys. 7.12. Selektywne ujęcie wody ze zbiornika

Omówiony tu przypadek, w przeciwieństwie do modelu migracji zanieczyszczeń w płaszczyźnie poziomej, nie należy do często stosowanych w praktyce. Z tego względu jeszcze nie wszystkie jego elementy zostały dokładnie opracowane. W szczególności dotyczy to współczynników transportu. Jeśli w konkretnym wypadku nie ma możliwości ich indywidualnego wyznaczenia, można stosować wzory omówione w par. 7.3.2.

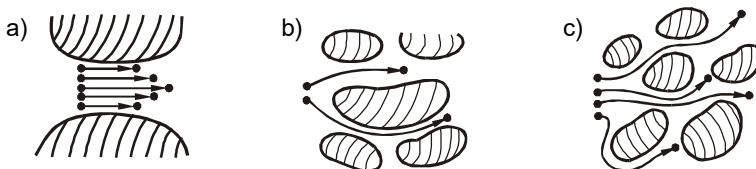
8. DYSPERSJA ZANIECZYSZCZEŃ W OŚRODKACH POROWATYCH

8.1. Mechanizm dyspersji hydrodynamicznej

W rozdziale 7 przedstawiliśmy pojęcie dyspersji masy substancji rozpuszczonej oraz energii cieplnej, jako procesu w istocie rzeczy zastępczego. Jest on umownym modelem, pozwalającym na uwzględnianie wpływu na transport masy i energii tych części rzeczywistych rozkładów prędkości, stężenia i temperatury, które zostają pominięte w uśrednionym opisie zjawiska. Podkreślmy raz jeszcze: *dyspersję wprowadzamy do równań migracji zanieczyszczeń tylko wtedy, gdy posługujemy się modelami o zmiennych uśrednionych względem jednej (dyspersja płaska) lub dwóch (dyspersja jednowymiarowa) zmiennych przestrzennych*. A chociaż dyspersja jest zjawiskiem pokrewnym adwekcji, to człon opisujący ten proces ma postać typową dla procesów dyfuzji (stosujemy prawo Ficka).

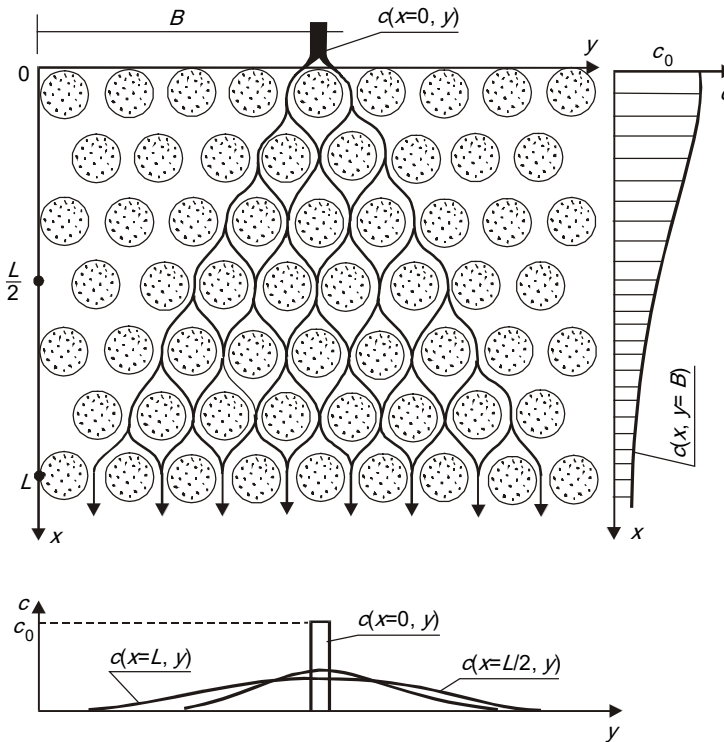
Przy rozważaniu przepływów cieczy niejednorodnej (zanieczyszczonej) w gruncie (lub szerzej: w ośrodkach porowatych) napotykamy na pewien efekt, wykazujący ogromne pokrewieństwo z omówionym już procesem dyspersji, choć ma on też istotne cechy indywidualne. Najczęściej nazywamy ten efekt *dyspersją hydrodynamiczną*, choć nazwa ta nie w pełni oddaje jego odrębną specyfikę (bowiem każda odmiana dyspersji jest powodowana czynnikami typu hydrodynamicznego). Z tego względu zamiennie będziemy mówili o *dyspersji w ośrodkach porowatych*, lub o *dyspersji filtracyjnej*.

Przyczynami zróżnicowania pola prędkości płynu filtrującego przez ośrodek porowaty jest lepkie tłumienie energii wewnątrz kanalików (rys. 8.1a), zmienność przekrojów tych kanalików (rys. 8.1b) oraz złożoność ich kształtów, powodująca duży wzrost krzywizny trajektorii cząstek płynu (rys. 8.1c).



Rys. 8.1. Czynniki różnicujące pole prędkości filtracji

Mechanizm rozprzestrzeniania się strumienia masy substancji rozpuszczonej w filtrującym płynie obrazuje schematycznie (w ujęciu płaskim) rys. 8.2. Początkowo skoncentrowany strumień tej masy, o stężeniu początkowym $c_0 = c(x=0, y)$, ulega podczas odpływu poszczególnych ziaren gruntu nieustannemu rozdzielaniu oraz łączeniu, przy czym łączące się strumyki wykazują różne stężenia substancji rozpuszczonej oraz/lub energii cieplnej. W szczególności na pobocznicy obszaru zanieczyszczonego strumyki płynu zawierającego substancję rozpuszczoną łączą się ze strumykami wody czystej. W rezultacie zasięg obszaru skażonego wzrasta, a rozkład stężenia substancji rozpuszczonej ulega specyficznemu spłaszczeniu. Rozkład ten, wyznaczony nawet dla tak uproszczonego schematu, jak na rys. 8.2, wykazuje charakterystyczne cechy krzywej Gaussa, co (obok wyników pomiarów stężenia) stanowi podstawę do zastosowania prawa Ficka w matematycznym opisie procesu dyspersji masy w ośrodku porowatym (a prawa Fouriera dla dyspersji energii cieplnej w takim obszarze).



Rys. 8.2. Mechanizm dyspersji masy w ośrodku porowatym

8.2. Uśrednianie zmiennych

Intensywność procesów transportu względnego (ilościowo opisanych członami typu dyfuzyjnego) zależy od stopnia dokładności opisu pola prędkości adwekcji, a więc od sposobu uśredniania rzeczywistych zmiennych, opisujących ruch masy lub energii.

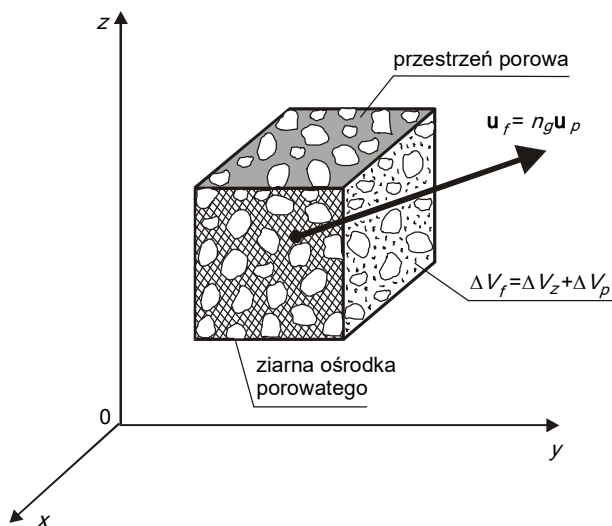
Przypomnijmy, że w klasycznej teorii filtracji cieczy jednorodnej posługujemy się *prędkością filtracji* \mathbf{u}_f (zwaną też *strumieniem jednostkowym* lub *strumieniem Darcy*). Definiuje ją następujące wyrażenie:

$$\mathbf{u}_f(x, y, z, t) = \frac{1}{\Delta V_f} \int_{\Delta V_f} \mathbf{u}(x, y, z, t) d(\Delta V_f). \quad (8.1)$$

Symbol ΔV_f (rys. 8.3) oznacza lokalną objętość ośrodka porowatego, którą przypisujemy dowolnemu punktowi przestrzeni o współrzędnych (x, y, z) . Istota tego przyporządkowania polega na tym, że prędkość filtracji w tym punkcie jest średnią wartością z prędkości rzeczywistych w tej objętości. Innymi słowy, objętość ta jest *otoczeniem* punktu (x, y, z) . Omawiana tu objętość elementarna stanowi oczywiście sumę *objętości ziaren* tworzących ośrodki porowate ΔV_z , oraz *objętości porów* między tymi ziarnami ΔV_p , czyli

$$\Delta V_f = \Delta V_z + \Delta V_p. \quad (8.2)$$

Wielkość tej elementarnej objętości kontrolnej ΔV_f wpływa na wynik uśredniania prędkości. Pod względem formalnym jest to zagadnienie identyczne z wpływem okresu uśredniania t_a w teorii turbulencji, gdy obliczenia wykonujemy według relacji (6.2). I podobnie jak tam, gdy musimy zgodnie z (8.1) uśredniać prędkość rzeczywistą, należy analizować wpływ ΔV_f na rezultat. Jednak także w tym przypadku zadania takie pojawiają się dość rzadko. W praktyce prezentowane tu definicje omawiamy do celów teoretycznych i poznawczych, gdyż uśrednionych zmiennych poszukujemy bezpośrednio jako rozwiązań uśrednionych równań, opisujących przenoszenie masy i energii.



Rys. 8.3. Obszar uśredniania zmiennych w teorii filtracji

Nie jest jednak możliwe zastosowanie relacji (8.1) do uśredniania stężenia i temperatury. Wynika to z faktu, że ziarna złoża mają swoje odrębne własności, a jako zbudowane z ciała stałego nie rozpuszczają substancji, migrujących w płynie, znajdującym się w porach. Również temperatura tych ziaren jest w ogólnym przypadku różna od temperatury płynu.

Z tego względu w teorii dyspersji hydrodynamicznej uśrednianie lokalne lepiej jest prowadzić w *lokalnej objętości porowej* ΔV_p . Dla wektora prędkości rzeczywistej \mathbf{u} definiujemy w ten sposób *prędkość porową*

$$\mathbf{u}_p = \frac{1}{\Delta V_p} \int_{\Delta V_p} \mathbf{u}(x, y, z, t) d(\Delta V_p). \quad (8.3)$$

Wzajemną zależność między tymi dwoma typami prędkości średniej (*prędkością filtracji* \mathbf{u}_f oraz *prędkością porową* \mathbf{u}_p) możemy wyznaczyć w prosty sposób, gdy szkielet gruntowy jest nieruchomy, czyli gdy

$$\frac{1}{\Delta V_z} \int_{\Delta V_z} \mathbf{u}(x, y, z, t) d(\Delta V_z) = 0. \quad (8.4)$$

Warunek ten powszechnie akceptuje się w teorii filtracji. Jeżeli nie jest on spełniony, czyli gdy ziarna ośrodka porowatego poruszają się, sytuacja jest bardziej złożona. Mamy wtedy do czynienia raczej z trudnym problemem geotechnicznym (upłynnienie gruntu, osiadanie podłoża). Uwzględniając (8.4), mamy

$$\int_{\Delta V_f} \mathbf{u} d(\Delta V_f) = \int_{\Delta V_p} \mathbf{u} d(\Delta V_p), \quad (8.5)$$

wobec czego z (8.1) i (8.3) otrzymujemy

$$\mathbf{u}_f \Delta V_f = \mathbf{u}_p \Delta V_p. \quad (8.6)$$

Iloraz obu objętości elementarnych, występujących w (8.6), jest jednym z podstawowych parametrów hydrauliki wód podziemnych i hydrogeologii, a mianowicie jest to *porowatość ośrodka* (lub ściślej: *współczynnik porowatości objętościowej*)

$$n_g = \frac{\Delta V_p}{\Delta V_f}. \quad (8.7)$$

Możemy więc (8.6) przepisać jako następującą relację:

$$\mathbf{u}_f = \mathbf{u}_p n_g, \quad (8.8)$$

pozwalającą na wzajemne przeliczanie \mathbf{u}_f i \mathbf{u}_p .

Jest to istotna zależność, bowiem w praktyce dynamika procesów filtracyjnych opisywana jest funkcją \mathbf{u}_f , podczas gdy w równaniach transportu (jak pokażemy niżej) występuje funkcja \mathbf{u}_p . Tę pierwszą wyznaczamy z równań zachowania masy i pędu roztworu, powszechnie przyjmując omówione już „przybliżenie dyfuzyjne” (podrozdz. 4.8). Polega ono na pominięciu wpływu obecności substancji rozproszonej oraz/lub energii cieplnej na ruch płynu. Zgodnie z klasyczną teorią filtracji [4, 134], prędkość uśredniona \mathbf{u}_f określana jest *prawem Darcy*, które dla *ośrodka izotropowego* (gdy *współczynnik filtracji* K jest skalarem) ma postać

$$\mathbf{u}_f = -K \text{ grad } \varphi. \quad (8.9)$$

Dla przypadku *anizotropowego* (gdy *współczynnik filtracji* jest tensorem $[K]$) mamy

$$\mathbf{u}_f = -[K] \text{ grad } \varphi. \quad (8.10)$$

Symbol φ oznacza tu *potencjał filtracyjny*

$$\varphi = z + p/\rho g. \quad (8.11)$$

Otrzymujemy go z równania zachowania masy, które w teorii filtracji przyjmuje postać *równania Richardsa* [134]

$$\rho S_c \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \text{div}(\rho [K] \text{grad } \varphi) \quad (8.12)$$

(S_c – współczynnik pojemności sprężystej).

Po wyznaczeniu z powyższych zależności funkcji \mathbf{u}_f , możemy z relacji (8.8) obliczyć prędkość porową \mathbf{u}_p .

W analogiczny do (8.3) sposób uśredniamy stężenie substancji rozpuszczonej, pisząc

$$\bar{c}(x, y, z, t) = \frac{1}{\Delta V_p} \int c(x, y, z, t) d(\Delta V_p), \quad (8.13)$$

oraz

$$\bar{T}(x, y, z, t) = \frac{1}{\Delta V_p} \int T(x, y, z, t) d(\Delta V_p). \quad (8.14)$$

Po wprowadzeniu wartości średnich \mathbf{u}_p , \bar{c} i \bar{T} , możemy zdefiniować *odchyłkę prędkości* \mathbf{u}^X , *odchyłkę stężenia* c^X oraz *odchyłkę temperatury* T^X , pisząc:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_p + \mathbf{u}^X, \quad (8.15)$$

$$c = \bar{c} + c^X, \quad (8.16)$$

$$T = \bar{T} + T^X. \quad (8.17)$$

8.3. Dyspersja masy

8.3.1. Równania zachowania masy substancji rozpuszczonej dla przypadku filtracji

Przepływ wody podziemnej w przestrzeni porowej ma najczęściej charakter laminarny. Z tego względu proces przenoszenia masy substancji rozpuszczonej w takim układzie opisany jest równaniem (4.190). Podstawiając w tym wyrażeniu prędkość \mathbf{u} i stężenie c według (8.15) i (8.16), możemy po wykonaniu oczywistych przekształceń napisać, że

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial c^X}{\partial t} + \text{div}(\bar{c} \mathbf{u}_p) + \text{div}(\bar{c} \mathbf{u}^X) + \text{div}(c^X \mathbf{u}_p) + \text{div}(c^X \mathbf{u}^X) = \\ = D_M \Delta \bar{c} + D_M \Delta c^X + \bar{Z} + Z^X. \end{aligned} \quad (8.18)$$

Przyjęto tu, że także funkcje źródłowe można przedstawić jako sumę wartości średniej i odchyłki.

Uśredniając obie strony (8.18) względem elementarnej objętości porowej ΔV_p , zgodnie z (8.13), otrzymamy następującą relację:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{c} \mathbf{u}_p) = D_M \Delta \bar{c} + \operatorname{div}(\overline{-c^x u^x}) + \bar{Z}. \quad (8.19)$$

Wykorzystano tu wykazany już fakt (par. 6.1.1, par. 7.2.1), że średnia wartość odchyłki funkcji jest równa zero. Uwzględniono też niezmiennosc obszaru całkowania w przestrzeni, skutkiem czego

$$\int_{\Delta V_p} D_M \Delta c^x d(\Delta V_p) = D_M \Delta \left\{ \int_{\Delta V_p} c^x d(\Delta V_p) \right\} \equiv 0 \quad (8.20)$$

W równaniu (8.19) pojawił się dodatkowy człon, utworzony przez uśredniony iloczyn odchyłek stężenia i prędkości. Ponownie wykorzystując rezultaty analiz, przeprowadzonych w trakcie dyskusji nad transportem turbulentnym (równ. (6.37)) oraz nad dyspersją (równ. (7.27)), możemy stwierdzić, że człon ten opisuje tę część adwekcyjnego strumienia masy, która wywołana jest odchyłką prędkości \mathbf{u}^x . Nazwiemy go *jednostkowym dyspersyjnym strumieniem masy*:

$$\mathbf{m}_{dh} = \overline{c^x \mathbf{u}^x}. \quad (8.21)$$

8.3.2. Prawo Ficka dla dyspersji hydrodynamicznej

Jak już wspomnieliśmy w podrozdz. 8.1, przebieg mieszania substancji rozpuszczonej w przepływie filtracyjnym nadaje rozkładowi stężenia tej substancji cechy krzywej Gaussa. Dzięki temu jako równanie konstytutywne dla jednostkowego strumienia (8.21) możemy przyjąć odpowiednio uogólnione prawo Ficka [70, 85]. Jeżeli proces transportu masy nie wykazuje jakiegoś uprzywilejowanego ukierunkowania, mówimy o *dyspersji hydrodynamicznej izotropowej*. W takim przypadku mamy

$$\mathbf{m}_{dh} = -D_G \operatorname{grad} \bar{c}, \quad (8.22)$$

gdzie D_G jest skalarnym *współczynnikiem dyspersji hydrodynamicznej*. Gdy jednak takie uprzywilejowane kierunki istnieją, wtedy mamy do czynienia z *dyspersją hydrodynamiczną anizotropową*. Współczynnik dyspersji jest wtedy wielkością tensorową, a prawo Ficka ma następującą postać:

$$\mathbf{m}_{dh} = -[D_G] \operatorname{grad} \bar{c}. \quad (8.23)$$

Problem anizotropii w procesie filtracji płynu przez ośrodek porowaty ma nieco inny charakter niż w przypadku turbulencji (gdzie cecha ta jest uwarunkowana strukturą fluktuacji prędkości, samorzutnie generowanych przez poruszający się płyn – par. 6.1.3) oraz w przypadku transportu masy w strumieniach i zbiornikach (gdzie wynika ona z przestrzenne- go zróżnicowania pola prędkości – par. 7.3.2). W rozważanym tu przypadku anizotropia (o ile występuje) spowodowana jest budową geologiczną ośrodka porowatego. Zagadnienie to nie jest jeszcze do końca zbadane. Wygląda na to, że jeśli ośrodek ma cechy anizotropowe, to ujawniają się one także w samym procesie filtracji, nawet dla cieczy jednorodnej. W takim przypadku także współczynnik filtracji staje się tensorem (równ. (8.10)). Ułatwia to badanie własności ośrodka.

Możemy mianowicie, analizując strukturę oraz historię i warunki powstawania ośrodka porowatego (który z punktu widzenia geologii stanowi skałę), określić ewentualnie istnieją-

ce uwarstwienia, ukierunkowania, czy inne rodzaje szczególnego uporządkowania cząstek tej skały. Najprawdopodobniej będą one wyznaczały kierunki *osi głównych*, dla których tensorowe współczynniki $[K]$ oraz $[D_G]$ będą miały postać diagonalną

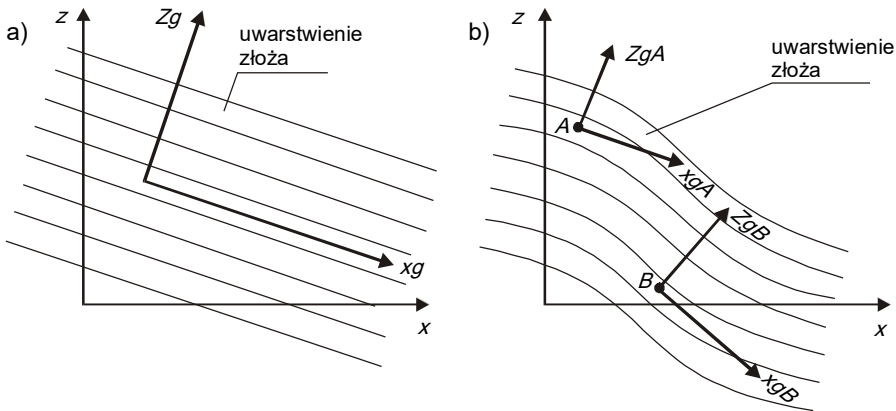
$$[K]_d = \begin{bmatrix} K_x & 0 & 0 \\ 0 & K_y & 0 \\ 0 & 0 & K_z \end{bmatrix}, [D_G]_d = \begin{bmatrix} D_{Gx} & 0 & 0 \\ 0 & D_{Gy} & 0 \\ 0 & 0 & D_{Gz} \end{bmatrix}. \quad (8.24)$$

Dla takich próbek skały możemy wyznaczyć laboratoryjnie diagonalne składowe obu tych współczynników. W trakcie pracy musimy dokładnie zidentyfikować orientację pobranej próbki, bowiem wyznaczone przez jej strukturę charakterystyczne kierunki (układ współrzędnych x_g, y_g, z_g – rys. 8.4) związane są z budową geologiczną obszaru. Układ taki z reguły nie będzie identyczny z układem (x, y, z) , zastosowanym do obliczeń. Ten ostatni przyjmowany jest bowiem stosownie do specyfiki rozważanego problemu, a w zagadnieniach z zakresu geofizyki najczęściej oś $0z$ sytuowana jest pionowo, wzdłuż kierunku siły ciężkości, zaś pozostałe dwie osie są najczęściej równoległe do kierunków odpowiednio: północ-południe oraz wschód-zachód, co ułatwia uwzględnianie *siły Coriolisa* [134].

Między układem obliczeniowym (x, y, z) , a wynikającym z budowy geologicznej (x_g, y_g, z_g) , istnieje czterowskaźnikowy tensor transformacji [55]. Wyznaczany jest on przez iloczyny cosinusów kątów między poszczególnymi parami osi obu układów, zgodnie z następującą zależnością:

$$[A_T] = A_{i_g}^i A_{j_g}^j = \cos(i_g, i) \cos(j_g, j). \quad (8.25)$$

Wskaźniki (i, j) oraz (i_g, j_g) przyjmują tu każdą z wartości (x, y, z) lub odpowiednio (x_g, y_g, z_g) .



Rys. 8.4. Wyznaczanie charakterystycznych kierunków anizotropii

Mając wyznaczone tensory (8.24) w postaci konkretnych wyrażeń matematycznych lub nawet liczb, możemy je przekształcić do postaci odpowiadającej dowolnemu układowi współrzędnych, zgodnie z relacjami:

$$[K] = [A_T] [K]_d, [D_G] = [A_T] [D_G]_d. \quad (8.26)$$

Proces wyznaczania omawianych tu współczynników jest względnie prosty w sytuacjach, gdy struktura ośrodka porowatego jest regularna (rys. 8.4a). W szczególności możemy mieć do czynienia z identycznymi układami (x, y, z) oraz (x_g, y_g, z_g) , na przykład w skałach osadowych, których warstwy układały się poziomo i nie były poddane żadnym ruchom górotwórczym. Gdy jednak warstwy te zostały pofałdowane (rys. 8.4b), uwzględnienie anizotropii staje się zadaniem złożonym.

8.3.3. Równanie transportu masy w wodzie podziemnej

Podstawiając równanie konstytutywne (8.21) lub (8.23) do równania zachowania masy (8.19), otrzymujemy równanie robocze, opisujące transport substancji rozpuszczonej w wodzie podziemnej. Dla przypadku izotropowego mamy

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{c} \mathbf{u}_p) = \operatorname{div}(D_{GE} \operatorname{grad} \bar{c}) + \bar{Z}, \quad (8.27)$$

zaś w warunkach anizotropowych piszemy (w kartezjańskim układzie współrzędnych)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\bar{c} u_{px}) + \frac{\partial}{\partial y}(\bar{c} u_{py}) + \frac{\partial}{\partial z}(\bar{c} u_{pz}) = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{GExx} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + D_{GExy} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + D_{GExz} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{GEyx} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + D_{GEyy} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + D_{GEyz} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{GEzx} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + D_{GEzy} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + D_{GEzz} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right). \end{aligned} \quad (8.28)$$

W pewnych sytuacjach, gdy rozmiary porów między ziarnami ośrodka porowatego są na tyle znaczne, że spełniony jest warunek (8.36), ruch filtracyjny z laminarnego przechodzi w burzliwy. Burzliwa filtracja nazywana jest niekiedy *fluacją*. Wyprowadzone wyżej równania są wtedy również ważne, przy czym zamiast współczynnika dyfuzji molekularnej D_M wstawiamy do nich sumę tego współczynnika i współczynnika dyfuzji burzliwej D_T .

8.3.4. Efektywny współczynnik dyspersji hydrodynamicznej

Występujące w dwóch ostatnich równaniach symbole D_{GE} (skalarny) lub odpowiednio $[D_{GE}]$ (tensorowy) oznaczają *efektywny współczynnik dyspersji* w ośrodku porowatym, w tym sensie, że stanowi on sumę współczynnika transportu molekularnego oraz współczynnika „czystej” dyspersji hydrodynamicznej, zgodnie z relacją

$$D_{GE} = D_M T_K + D_G, \quad [D_{GE}] = D_M T_k[E] + [D_G]. \quad (8.29)$$

Mnożnik T_K oznacza tak zwaną *krętość* ośrodka porowatego [70]. Wprowadza się go dla uwzględnienia faktu, iż wskutek obecności ziaren wypełnienia nie tylko rzeczywista

adwekcja, ale także rzeczywista dyfuzja molekularna przebiega wzdłuż dystansu dłuższego niż prostoliniowa odległość między punktem początkowym i końcowym. Aby więc skompensować różnicę między obliczeniową (krótszą) a rzeczywistą (dłuższą) drogą dyfuzji, należy zmniejszyć obliczeniowy współczynnik dyfuzji molekularnej i -tej substancji rozpuszczonej D_{Mi} . Mnożymy go w tym celu właśnie przez $T_K < 1$. Można tu przyjmować:

$$\begin{aligned} \text{dla piasków} & T_K = 0,50 - 0,70, \\ \text{dla piaskowców} & T_K = 0,25 - 0,50. \end{aligned} \quad (8.30)$$

Ze względu na wymogi formalne, w przypadku anizotropowym musimy do relacji (8.29) wprowadzić tensor jednostkowy [E].

Przejdźmy teraz do omówienia wartości współczynnika dyspersji D_G . Jego teoria jest znacznie lepiej rozwinięta dla przepływu izotropowego niż dla anizotropowego. Wartość współczynnika zależy od liczby Pecleta (4.277), która w tym przypadku definiowana jest poprzez moduł prędkości porowej u_p oraz charakterystyczny wymiar porów d_p , często przyjmowany jako $d_p = d_{50}$ (czyli jako średnicę, która wraz z mniejszymi obejmuje 50% próbki materiału porowatego). Mamy więc

$$Pe = \frac{u_p d_p}{D_{Mi}} \quad (8.31)$$

Analiza problemu pozwala na wyróżnienie pięciu różnych zakresów dyspersji w ośrodkach porowatych:

- 1) pomijalnie mały wpływ dyspersji, dominacja dyfuzji molekularnej – dla $Pe < 0,4$

$$D_G = 0; \quad (8.32)$$

- 2) równoważność dyfuzji molekularnej i dyspersji hydrodynamicznej – dla $0,4 < Pe < 5,0$

$$D_G = D_M T_K; \quad (8.33)$$

- 3) przewaga dyspersji hydrodynamicznej – dla $5,0 < Pe < 20,0$

$$D_G = 0,5 Pe^{1,2} D_M, \quad (8.34)$$

lub w uproszczeniu

$$D_G = 1,4 Pe D_M; \quad (8.35)$$

- 4) pomijalnie mały wpływ dyfuzji molekularnej – dla $Pe > 20,0$, aż do liczb Pecleta rzędu kilku tysięcy;

- 5) dyspersja w warunkach nieliniowego prawa Darcy'ego, gdy wartość Pe przekracza kilka tysięcy, zaś liczba Reynoldsa [134]

$$Re = \frac{u_r d_{10}}{\nu} > Re_{fc}, \quad (8.36)$$

gdzie dla piasku grubego $Re_{fc} = 3 - 10$, zaś dla piasku drobnego $Re_{fc} = 0,034 - 0,240$.

Dla warunków anizotropowych przyjmuje się, że współczynniki w diagonalnej postaci tensora (8.24) wyrażone są relacjami ($i = x, y, z$) [4, 32]

$$D_{Gi} = M_{fi} u_p. \quad (8.37)$$

Mnożniki M_{fi} (o wymiarze liniowym) wyznacza się empirycznie (par. 8.3.2), co pozwala zgodnie z (8.25) wyznaczyć wartości D_{GEij} dla dowolnego układu współrzędnych.

8.3.5. Formułowanie zagadnień i ich rozwiązywanie

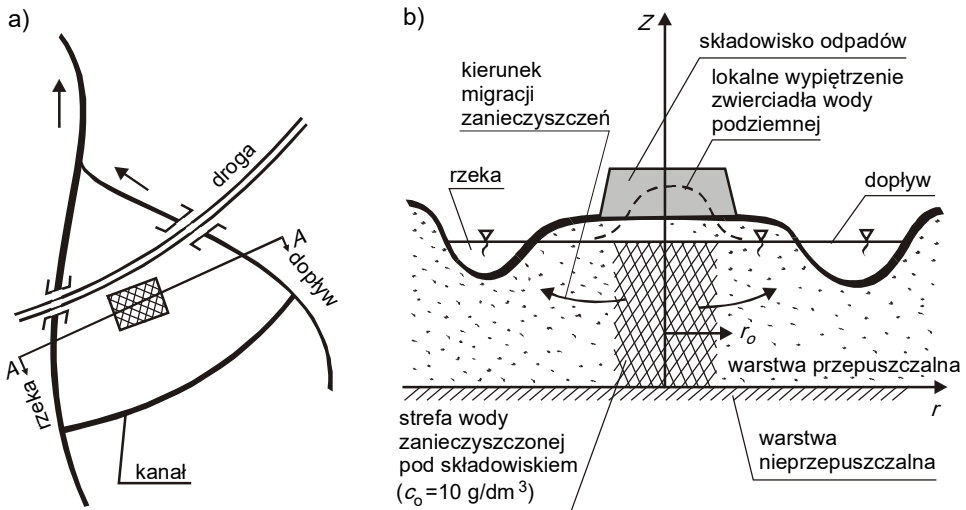
Ze względu na postać równania transportu w ośrodku porowatym (8.27) lub (8.28), sposób stawiania zagadnienia jest w zasadzie identyczny z już omówionym dla przypadku dyfuzji molekularnej oraz dla pozostałych procesów pokrewnych dyfuzji (podrozdz. 4.1).

Piszemy „w zasadzie”, bo pewne różnice pojawiają się przy wyborze kształtu obszaru obliczeniowego, co wynika ze specyfiki procesu filtracji. Bardzo istotne jest też wzajemne oddziaływanie wody podziemnej oraz kontaktującej się z nią wody wypełniającej koryto rzeczne lub zbiornik otwarty (jezioro, morze itp.). Nie będziemy jednak tych kwestii tu poruszać, gdyż są one szeroko omawiane w podręcznikach, obejmujących ruch płynu w ośrodkach porowatych (np. [4, 40, 134]). Należy tu także zwrócić uwagę na właściwy dobór funkcji źródłowych (podrozdz. 4.10). Podczas przepływu cieczy niejednorodnej przez ośrodek porowaty szczególnego znaczenia nabiera proces *adsorpcji* (pkt 4.10.3.8), bowiem ziarna tworzące ten ośrodek mogą przejmować pewną część masy niektórych substancji rozpuszczonych, które w dalszej kolejności, gdy ich stężenie w wodzie opadnie, mogą być przekazywane z powrotem do roztworu (desorpcja).

Również już omówione ogólne zasady rozwiązywania równań migracji (podrozdz. 4.12) zachowują ważność przy opisie dyspersji w gruncie.

Przykład 8.1

Zakłady przemysłu chemicznego położone są w centralnej części terenu, otoczonego ciekami wodnymi (rzeką, jej dopływem i kanałem), tworzącymi zwarty obwód o rozpiętości około 8000 m (rys. 8.5a). Odpady produkcyjne z tych zakładów transportowane są hydraulicznie na otwarte składowisko, którego wymiary w planie wynoszą 200×200 m. Infiltrująca z masy odpadów do podłoża wody deszczowe i obiegowe powodują, że pod korpusem składowiska utrzymuje się obszar wody podziemnej, zanieczyszczonej głównie chlorkiem sodu. Przeciętne jego stężenie wynosi $c_0 = 10,0$ g/dm³. Grubość warstwy wodonośnej wynosi $H = 10,0$ m. Oszacować roczny ładunek chlorku sodu, który może przedostać się ze składowiska do okolicznych cieków.



Rys. 8.5. Schemat obliczeniowy do przykładu 8.1 (a – plan, b – przekrój pionowy A–A)

Rozwiązanie

Sformułowane wyżej zadanie można rozwiązać, jak zawsze w interesujących nas tu zagadnieniach, z różną dokładnością. Zasadnicze znaczenie dla przebiegu migracji $NaCl$ między składowiskiem a wodami rzek ma oczywiście adwekcja. W przypadku intensywnego odpływu zasolonych ścieków z korpusu, zwierciadło wody podziemnej może ulegać nawet znacznemu wypiętrzeniu (rys. 8.5b), zwiększając natężenie migracji soli. Opis adwekcji w takiej sytuacji wymagałby rozwiązania którejś z dokładniejszych wersji równań filtracji [134], wraz z ogólnym równaniem dyspersji (8.27) lub (8.28). W pierwszej kolejności spróbujmy posłużyć się jednak modelem prostszym, uwypuklając fakt, że ścieki infiltrują ze składowiska głównie w okresach deszczowych, zaś między opadami transport soli powodowany jest głównie przez dyfuzję.

Przyjmijmy schemat obliczeniowy jak na rys. 8.5b – zanieczyszczony odpływ ze składowiska trafia do warstwy wodonośnej przez strefę nienasyconą, a z obszaru wody zanieczyszczonej chlorek sodu przemieszcza się dyfuzyjnie. Dodatkowo przyjmijmy, że zjawisko można potraktować jako symetryczne względem pionowej osi $0z$, a proces migracji – jako jednowymiarowy i ustalony. Równanie transportu (8.27) przyjmie wtedy prostą postać

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(D_M r \frac{\partial \bar{c}}{\partial r} \right) = 0.$$

Jako warunki brzegowe możemy przyjąć:

$$\bar{c} = \bar{c}_o = 10,0 \text{ g/dm}^3 \text{ dla } r = r_o = 100,0 \text{ m; } \bar{c} = 0 \text{ dla } r = R = 4000,0 \text{ m.}$$

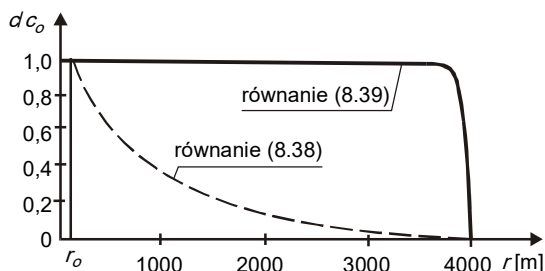
Ze względu na stałą wartość współczynnika $D_M = 1,5 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ (tabl. 6), możemy powyższe równanie łatwo rozwiązać [11], otrzymując

$$\bar{c}(r) = A_1 \ln(r/A_2).$$

Po wyznaczeniu stałych całkowania A_1 i A_2 z podanych wyżej warunków brzegowych, mamy rozkład stężenia $NaCl$ dany funkcją

$$\bar{c} = \bar{c}_o \frac{\ln(r/R)}{\ln(r_o/R)}. \quad (8.38)$$

Obrazuje go rys. 8.6.



Rys. 8.6. Stężenie $NaCl$ w wodzie podziemnej (przykład 8.1)

Interesujący nas tu ładunek chlorku sodu L_{cs} obliczymy z prawa Ficka (4.84), które w tym prostym przypadku pozwala napisać, że

$$L_{cs} = -2\pi r HD_M \frac{\partial \bar{c}}{\partial r}.$$

Po obliczeniu pochodnej funkcji (8.38) mamy dla okresu bezdeszczowego

$$L_{cs}^B = -2\pi HD_M \bar{c}_o / \ln(r_o/R) = 8,1 \text{ kg/rok}.$$

Jak widać, jest to znikoma ilość substancji zanieczyszczonej.

W następnej kolejności uwzględnijmy proces adwekcji, jednak pozostawiając inne z już wprowadzonych uproszczeń. Równanie migracji ma wtedy postać

$$v_r \frac{\partial \bar{c}}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{GE} r \frac{\partial \bar{c}}{\partial r} \right),$$

a warunki brzegowe pozostają bez zmian. Całka ogólna ma postać funkcji

$$\bar{c}(r) = A_1 r^{F_p} / F_p + A_2,$$

gdzie funkcja pomocnicza

$$F_p = Q / (2\pi HD_{GE}).$$

Po wyznaczeniu stałych całkowania A_1 i A_2 otrzymujemy

$$\bar{c}(r) = \bar{c}_o \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^{F_p} \right]. \quad (8.39)$$

Wydatek infiltrującej wody Q składa się częściowo z opadu atmosferycznego, a częściowo z wody, pochodzącej z obiegu transportującego odpady na składowisko. Przyjmując, że średni opad roczny wynosi $h_d = 600$ mm H₂O, zaś parowanie efektywne jest równe $h_p = 400$ mm H₂O, oraz zakładając możliwość pominięcia strat wody obiegowej, mamy

$$Q = (h_d - h_p) \pi r_o^2.$$

Średnia prędkość porowa wody podziemnej (dla $r = R/2$, przy porowatości gruntu $n_g = 0,40$) jest równa $v_p = 2 \times 10^{-9}$ m/s. Przy przeciętnej średnicy ziaren gruntu $d_p = 0,0005$ m, liczba Pecleta wynosi tu $Pe = 0,0007$. Znajdujemy się więc w pierwszym przedziale intensywności migracji, gdy według (8.32) $D_{GE} = D_M$ (czyli pomijamy dyspersję, a obok adwekcji uwzględniamy tylko dyfuzję molekularną). Pomocnicza funkcja F_p w (8.39) jest tu równa $F_p = 2693$. Wykres funkcji $\bar{c}(r)$ według (8.39) dla takiego przypadku pokazano na rys. 8.6. Jest to krzywa tego samego typu, jak i rozwiązanie przykładu 4.7 (rys. 4.43) – stężenie jest praktycznie stałe w całym obszarze i tylko w bezpośrednim sąsiedztwie odbiornika gwałtownie spada do drugiej z wartości brzegowych. Jest to konsekwencją dominacji adwekcji nad dyfuzją.

Wynik ten pozwala przyjąć z dość dobrym przybliżeniem, że praktycznie cała ilość infiltrującej wody opadowej, o stężeniu $NaCl$ równym c_o , trafia do cieków, a więc

$$L_{cs}^A = Q \bar{c}_o = 80\,000 \text{ kg/rok}.$$

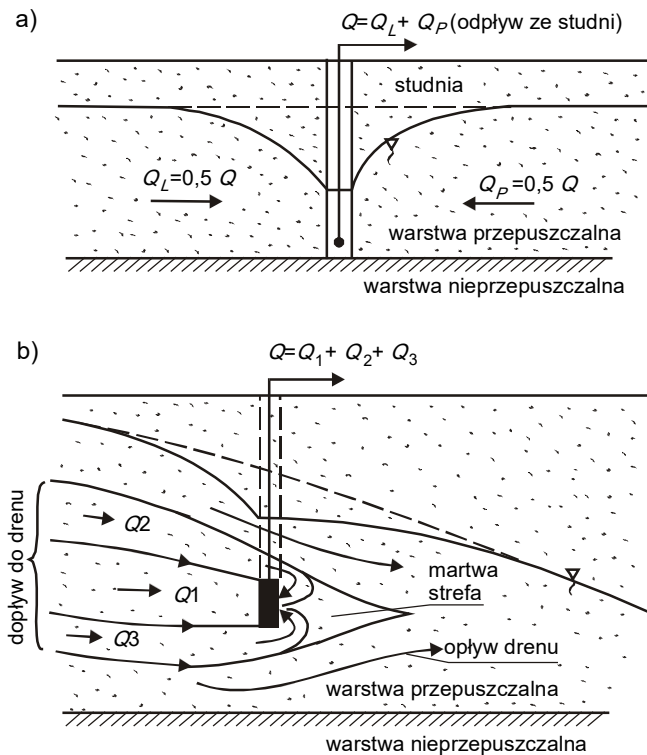
Zestawienie wyników, otrzymanych dla obu zastosowanych tu modeli (ładunek soli L_{cs}^B dla przypadku bezruchu wody podziemnej oraz L_{cs}^A gdy dominuje adwekcja) pokazuje rozrzut dokładności opisu zjawiska, zależnie od zastosowanej metody. Nakazuje on szcze-

gólną uwagę i ostrożność przy wprowadzaniu założeń upraszczających na etapie formułowania zagadnienia. ■

8.4. Makrodyspersja w gruncie

8.4.1. Uwagi ogólne

Uśrednianie zmiennych w przestrzeni porowej (podrozdz. 8.2) odbywa się w bardzo ograniczonej skali. Jest to oczywiście konsekwencją charakterystyki procesu filtracji oraz całkowicie odpowiada celom, którym ma służyć. W istocie rzeczy uśrednianie to wykazuje raczej analogię z uśrednianiem zmiennych w ruchu burzliwym niż z procesami dyspersji w rzekach i zbiornikach. Co prawda istnieje tu istotna różnica (w jednym przypadku uśrednianie odbywa się w czasie, a w drugim – w lokalnym elemencie przestrzeni), ale niekiedy staje się ona mniej istotna (gdym charakterystyki zjawiska uśrednione w czasie są identyczne z charakterystykami uśrednionymi w przestrzeni; proces taki nazywamy *ergodycznym* [101]). Zresztą wspomniana wyżej analogia nie ma znaczenia praktycznego, a przywołaliśmy ją tu tylko dla uwypuklenia jeszcze jednego poziomu uśrednienia, stosowanego w teorii filtracji.



Rys. 8.7. Przykłady symetrii i asymetrii przepływu wód podziemnych

Proces względnego przenoszenia masy oraz/lub energii cieplnej, wynikający z tego drugiego poziomu uśrednienia, nazwiemy *makrodyspersją*. Jest on jeszcze stosunkowo

słabo rozpoznany, bowiem w praktycznych zastosowaniach teorii ruchu płynu w ośrodkach porowatych dominują modele jednowymiarowe, lub co najwyżej płaskie, w których nie przywiązuje się dużej wagi do przestrzennej zmienności pola prędkości. Niestety, w niektórych sytuacjach musi to prowadzić do dużej rozbieżności między wynikami obliczeń a rzeczywistą charakterystyką przepływu. Jeżeli bowiem dla układów regularnych, symetrycznych, otrzymujemy równomierny i symetryczny przepływ (na przykład rys. 8.7a), który można z dobrą dokładnością opisać modelem uśrednionym (1D lub 2D) [134], to nierzadko obserwujemy układy nieregularne, dla których nie należy stosować modeli uproszczonych (na przykład rys. 8.7b) [121]. Właściwy opis struktury takiego przepływu jest ważny szczególnie wtedy, gdy interesuje nas ruch cieczy niejednorodnej (w tym przypadku – proces migracji zanieczyszczeń w wodach podziemnych).

8.4.2. Ilościowy opis procesu makrodyspersji

Raz jeszcze podkreślmy istnienie dwóch kategorii przepływów filtracyjnych. Dla pierwszej z nich, o regularnym charakterze (rys. 8.8a), pole prędkości wykazuje znikomą zmienność w przekroju poprzecznym strumienia (a nawet wzdłuż niego). Dyspersja zanieczyszczeń odbywa się wtedy tylko w skali lokalnej, na poziomie ziaren gruntu. Z kolei dla drugiej kategorii (rys. 8.8b) poprzeczna zmienność pola prędkości bywa bardzo istotna. Niekiedy w takim stopniu, że nie wolno jej pomijać (rys. 8.7b). Jeżeli jednak decydujemy się wtedy zastosować model uproszczony, w którym rzeczywistą prędkość porową \mathbf{u}_p oraz stężenie substancji rozpuszczonej \bar{c} zastąpimy wartościami średnimi, zgodnie z relacjami:

$$\mathbf{u}_p = \mathbf{v}_p + \mathbf{u}_p^o, \quad (8.40)$$

$$\bar{c} = \bar{c} + c^o, \quad (8.41)$$

to w konsekwencji musimy postąpić tak, jak czyniliśmy to przy wprowadzaniu pojęcia dyspersji w rozdz. 7. Podstawiając powyższe relacje do równania (8.27) i uśredniając je względem przekroju poprzecznego strumienia wody podziemnej, otrzymamy

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + v_{px} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{GE} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(-\overset{\wedge\wedge\wedge\wedge\wedge\wedge}{u_{px}^o c^o} \right) + \bar{Z}. \quad (8.42)$$

Przedostatni człon tego równania jest typowym wyrażeniem, opisującym adwekcyjny transport masy, powodowany przez odchyłkę prędkości porowej u_{px}^o . Nazwiemy go więc *makrodyspersyjnym strumieniem masy*

$$m_{mdx} = \overset{\wedge\wedge\wedge\wedge\wedge\wedge}{u_{px}^o c^o}. \quad (8.43)$$

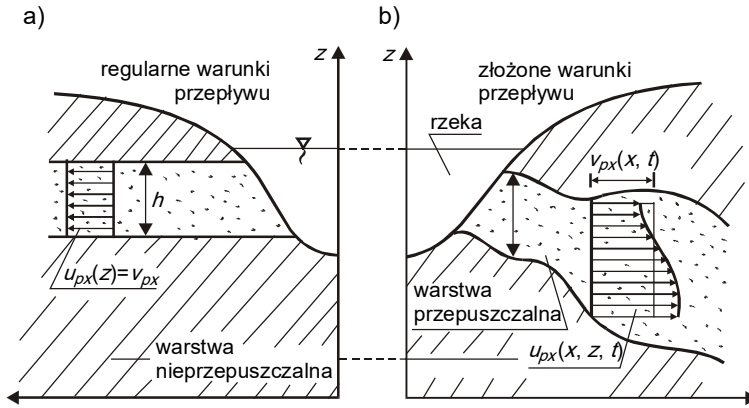
Tak jak i poprzednio, również tutaj stosuje się uogólnienie prawa Ficka, zgodnie z którym

$$m_{mdx} = -D_{MG} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}. \quad (8.44)$$

Wielkość D_{MG} oznacza *współczynnik makrodyspersji*. Jeżeli istnieją po temu warunki, możemy go wyznaczyć empirycznie [32], korzystając z relacji (6.106). Można też korzystać z relacji uproszczonej [130]

$$D_{MG} = 6,85 (i_G - i_D)^2 \bar{D}_{GE}, \quad (8.45)$$

otrzymanej na drodze eksperymentów numerycznych. Symbole i_G oraz i_D oznaczają tu odpowiednio spadek stropu i spągu warstwy wodonośnej. Zauważmy, że jeśli oba te spadki są sobie równe, to $D_{MG} = 0$ (przepływ równomierny, jak na rys. 8.8a).



Rys. 8.8. Proces makrodyspersji w gruncie

Równanie migracji (8.42) przyjmie wtedy postać

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + v_{px} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \bar{D}_{GE} [1 + 6,85(i_G - i_D)^2] \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right\} + \bar{Z}. \quad (8.46)$$

Uśredniony dla rozważanego obszaru współczynnik dyspersji hydrodynamicznej \bar{D}_{GE} wyznaczamy w sposób opisany w par. 8.3.4.

8.5. Dyspersja energii cieplnej w gruncie

Rzeczywiste rozprzestrzenianie się energii cieplnej w płynie filtrującym przez ośrodek porowaty jest powodowane w pierwszym rzędzie jej adwekcją oraz przewodzeniem molekularnym. W dość rzadkich przypadkach filtracji burzliwej (fluacji), adwekcję opisujemy zmiennymi uśrednionymi w czasie, a wtedy odrzucone w trakcie uśredniania fluktuacje zmiennych uwzględniamy poprzez pojęcie burzliwego przewodzenia ciepła. W realnych zagadnieniach posługujemy się zmiennymi uśrednionymi w przestrzeni porowej (podrozdz. 8.2), a wpływ odchyłek prędkości i temperatury ujmujemy proces nazwany dyspersją hydrodynamiczną. I wreszcie jeśli decydujemy się na uśrednienie prędkości i temperatury w przekroju poprzecznym strumienia filtrującego płynu, pojawia się potrzeba uwzględnienia makrodyspersji energii cieplnej.

Wszystkie zestawione wyżej procesy jednostkowe są formalnie identyczne ze swymi odpowiednikami dla procesu przenoszenia masy substancji rozpuszczonej. Pozwala to na bezpośrednią adaptację już omówionych relacji i modeli. Istnieje jednakże jeden czynnik, który dotyczy tylko przenoszenia energii cieplnej, który nie pojawia się w trakcie przenoszenia zanieczyszczeń materialnych – jest nim mianowicie *przewodnictwo cieplne szkieletu gruntowego*.

Samo przekazywanie energii cieplnej między płynem (o temperaturze T) oraz szkieletem gruntowym (o temperaturze T_s) nie jest istotnym utrudnieniem w opisie interesującego nas procesu, gdyż ma ono ilościowo charakter procesu źródłowego. Wynika to z rozdrobnienia ziaren ośrodka porowatego i ich ciągłego rozkładu w przestrzeni. Dzięki temu możemy odnieść proces przekazywania energii do każdego punktu przestrzeni i opisać go funkcją ciągłą. Tak zdefiniowany czynnik źródłowy formalnie odpowiada *adsorpcji* masy w trakcie filtracji (pkt 4.10.3.8) i może być opisany relacją, określaną mianem *prawa Newtona* (pkt 4.11.4.4). Zgodnie z tym prawem, ładunek energii cieplnej, odniesiony do jednostki masy substancji, który w jednostce czasu jest przejmowany przez fazę o wyższej temperaturze, jest równy

$$q_{PE} = q_{PT} \rho C_w = \alpha_{PE}(T - T_s) = \alpha_{PT} \rho C_w (T - T_s). \quad (8.47)$$

Współczynnik przejmowania ciepła może być wyrażony jako mnożnik α_{PE} , przeliczający różnicę temperatury na intensywność przekazywania energii cieplnej q_{PE} , albo (po podzieleniu przez gęstość i ciepło właściwe) jako α_{PT} , określający szybkość zmiany temperatury q_{PT} . Ta druga forma jest dla nas dogodniejsza, co wynika z postaci równania zachowania energii (4.189).

Wyznaczenie tego współczynnika jest z natury rzeczy szeroko omawiane w literaturze poświęconej wymianie ciepła i ogrzewnictwu (np. [107, 150]). Jest on tam odnoszony nie do jednostki objętości, lecz do jednostki powierzchni, przez którą zachodzi wymiana ciepła. Oznacza się go symbolem α_T . Przeliczenie go tak, aby odnosił się do jednostki objętości, jest stosunkowo proste, gdy przyjmujemy, że ziarna złoża mają kształt kul o średnicach d_p . Możemy wtedy napisać, że

$$\alpha_{PT} = \frac{\alpha_{PE}}{\rho C_w} = \frac{6\alpha_T}{d_p \rho C_w}. \quad (8.48)$$

Wartość α_T uzależniona jest zarówno od własności płynu, jak też od geometrycznej charakterystyki ośrodka i od warunków ruchu. Najczęściej wyraża się ją jako zależność *liczby Nusselta*

$$\text{Nu} = \frac{\alpha_T l_{CH}}{\lambda} \quad (8.49)$$

od innych liczb kryterialnych (w klasycznej teorii – od *liczby Reynoldsa* Re oraz od *liczby Prandtla* Pr) [107]. Orientacyjna wartość α_T dla przepływu wody w gruncie jest rzędu

$$\alpha_T = 700 \text{ [J/m}^2 \text{ s K]}. \quad (8.50)$$

Drugim czynnikiem (obok przejmowania energii między płynem a szkieletem ośrodka porowatego), który wyróżnia omawiany tu proces, jest przewodzenie ciepła przez materiał tworzący złożę. Powoduje ono uzmiennienie rozkładu temperatury złoża względem czasu i przestrzeni. Funkcję $T_s(x, y, z, t)$, podobnie jak i temperaturę płynu $T(x, y, z, t)$, można opisać, wykorzystując *prawo zachowania energii*. Jego sformułowanie oraz wyprowadzenie opisującego je równania jest niemal identyczne z procedurą już omówioną w par. 4.2.7. Różnica polega tylko na tym, że złożę będziemy traktowali jako ośrodek nieruchomy (brak adwekcji), bowiem opis procesu płynięcia materiału porowatego byłby sam w sobie bardzo trudnym zadaniem, nawet bez uwzględniania towarzyszącej mu wymiany ciepła. Wobec powyższego *równanie zachowania energii* dla złoża otrzymamy bezpośrednio z odpowiedniej relacji dla filtrującego płynu. Musimy tylko pamiętać, że w obu tych równaniach funk-

cja (8.47) musi mieć przeciwne znaki, gdyż oddawanie ciepła przez jeden składnik oznacza jego pobieranie przez drugi.

Tak więc dla przypadku izotropowego, wykorzystując równanie (8.27), możemy napisać następujące *równanie dyspersji energii* dla płynu:

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\mathbf{T}}\mathbf{u}_p) = \operatorname{div}(D_{GE} \operatorname{grad} \bar{T}) - \alpha_{PT}(\bar{T} - \bar{T}_s) + \bar{q}_{es}. \quad (8.51)$$

Dla anizotropowej dyspersji ciepła w filtrującym płynie z (8.28) otrzymamy

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\mathbf{T}}\mathbf{u}_p) = \operatorname{div}([D_{GE}] \operatorname{grad} \bar{T}) - \alpha_{PT}(\bar{T} - \bar{T}_s) + \bar{q}_{es} \quad (8.52)$$

Natomiast dla szkieletu ośrodka porowatego możemy w myśl powyższych uwag napisać, że

$$\frac{\partial \bar{T}_s}{\partial t} = G_T \Delta \bar{T} + \alpha(\bar{T} - \bar{T}_s) + \bar{Z}_G, \quad (8.53)$$

gdzie λ_g – przewodność cieplna gruntu (dla piasków $\lambda_g = 1,0$ [J/m s K]).

Na szczęście dla przepływów powolnych, gdy

$$\operatorname{Re} = \frac{u_p d_p}{\nu} < 1, \quad (8.54)$$

różnice w przebiegu wymiany ciepła między płynem filtrującym a gruntem można zaniebierać, przyjmując, że $T = T_s$.

Także dla stanu ustalonego możemy posłużyć się jednym równaniem transportu ciepła, otrzymanym z (8.51) dla warunków izotropowych. Ma ono postać

$$\operatorname{div}(\bar{\mathbf{T}}\mathbf{u}_p) = \operatorname{div}(D_{ME} \operatorname{grad} \bar{T}) + \bar{q}_{es} \quad (8.55)$$

Współczynnik przenoszenia D_{ME} jest tu średnią ważoną dla płynu i ośrodka porowatego, obliczoną ze wzoru

$$D_{ME} = [n_e \lambda + (1 - n_e) \lambda_g] / [\rho C_{ww} n_e + \rho_g C_{wg} (1 - n_e)], \quad (8.56)$$

gdzie: n_e – porowatość efektywna gruntu, λ , ρ , C_{ww} – przewodność cieplna, gęstość i ciepło właściwe płynu, λ_g , ρ_g , C_{wg} – te same parametry dla gruntu.

Sposób stawiania zagadnienia oraz proces jego rozwiązywania podlegają tym samym zasadom ogólnym, które już omawialiśmy dla poprzednich procesów transportu.

Przykład 8.2

Piezometry, umieszczone w pobliżu bloku energetycznego elektrowni węglowej, wykazują wyraźny wzrost temperatury wody podziemnej. Możliwe iż jest to spowodowane procesem przewodzenia ciepła z rejonu kotła, lecz właściciel obiektu chciałby odpowiedzieć na pytanie, czy nie należy brać pod uwagę możliwości przecieku gorącej wody technologicznej (co stwarzałoby duże zagrożenie w przypadku zawilgocenia pobliskich przewodów wysokiego napięcia). Rozstrzygnąć wątpliwości właściciela obiektu.

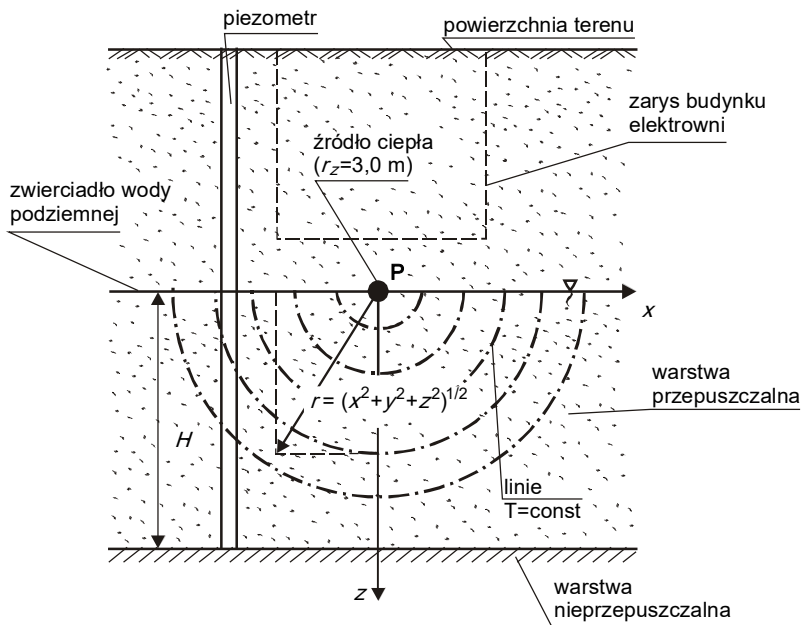
Rozwiązanie

Podobnie jak większość poprzednich przykładów, także ten można rozwiązać w stosunkowo dokładny sposób, wykorzystując możliwie najbardziej ogólne postacie omówionych już równań.

Jednakże stosowanie tak rozbudowanych metod byłoby w tym miejscu niecelowe. Ograniczmy się więc do wyznaczenia przybliżonego rozwiązania zadania. Załóżmy mianowicie najpierw, że instalacja jest szczelna, wobec czego obserwowany wzrost temperatury w wodzie podziemnej jest spowodowany jedynie przewodzeniem ciepła. Jeśli wyniki obliczeń dla takiego przypadku będą wykazywały dobrą zgodność z wynikami pomiarów, to będziemy mieli podstawy by uważać, że nasze założenie jest słuszne.

Przyjmijmy dalej, że układ zwierciadła wody pod budynkiem elektrowni jest poziomy (w przeciwnym razie układ izolinii temperatury, wyznaczony w trakcie pomiarów, byłby wydłużony w kierunku ruchu wody, a tak nie jest). Schemat obliczeniowy pokazano na rys. 8.9. Ze względu na dość regularny kształt obszaru, zadanie możemy potraktować jako środkowosymetryczne i napisać równanie transportu ciepła (8.15) w postaci bardzo prostej

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\bar{T}}{dr} \right) = 0.$$



Rys. 8.9. Schemat obliczeniowy do przykładu 8.2

Jako warunki brzegowe możemy przyjąć

$$\bar{T} = \bar{T}_z \text{ dla } r = r_o, \quad \bar{T} = \bar{T}_o \text{ dla } r \rightarrow \infty.$$

Równanie powyższe możemy łatwo rozwiązać [11], otrzymując całkę ogólną

$$\bar{T}(r) = A_1/r + A_2.$$

Stałe całkowania w tym przypadku są równe

$$A_1 = (\bar{T}_z - \bar{T}_o)r_z, \quad A_2 = \bar{T}_o,$$

toteż całka szczególna ma postać funkcji

$$\bar{T}(r) = (\bar{T}_z - \bar{T}_o) \frac{r_z}{r} + \bar{T}_o.$$

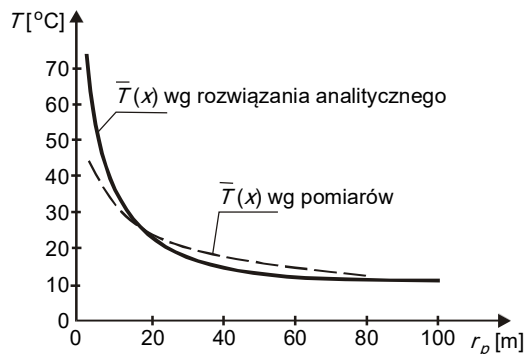
Rozkład temperatury jest więc opisany powierzchniami kulistymi, zaznaczonymi w przekroju płaskim na rys. 8.9. Jednakże przed porównaniem otrzymanych powyżej wyników z rezultatami pomiarów musimy funkcję $\bar{T}(r)$ uśrednić względem pionu, bowiem w piezometrach mierzy się nie temperaturę punktową, lecz właśnie średnią. Możemy napisać, że

$$\bar{T}(r_p) = \frac{1}{H} \int_0^H \bar{T}(r) dx = (\bar{T}_z - \bar{T}_o)r_z \ln \left| \frac{H}{r_p} + \sqrt{1 + \frac{H^2}{r_p^2}} \right| / H + \bar{T}_o.$$

Symbol r_p oznacza tu odległość od osi pionowej w kierunku poziomym, czyli

$$r_p = \sqrt{x^2 + y^2}.$$

Rozkład temperatury zmierzonej w piezometrach dla pewnego konkretnego przypadku pokazano na rys. 8.10. Do obliczeń można tu było przyjąć $\bar{T}_z = 70^\circ\text{C}$, $\bar{T}_o = 10^\circ\text{C}$, $r_z = 3,0$ m, $H = 10,0$ m. Jak widać na rys. 8.10, obliczony rozkład temperatury średniej $\bar{T}(r_p)$ jest bardzo zbliżony do rozkładu rzeczywistego. Oznacza to, że najprawdopodobniej założenie o braku przecieku wody technologicznej jest prawdziwe. Oczywiście, na życzenie strony zainteresowanej zawsze można powtórzyć obliczenia, stosując model o większej dokładności.



Rys. 8.10. Rozwiązanie przykładu 8.2

■

9. MODELE BEZDYFUZYJNE

9.1. Uwagi ogólne

Omawiając w par. 6.5.3 strukturę obszaru, w którym następuje rozprzestrzenianie substancji rozpuszczonej oraz/lub energii cieplnej dla odbiornika o charakterze strumienia (rys. 6.16, 6.20, 6.21), stwierdziliśmy, że w obrębie *pola bliskiego* stężenie tej substancji (lub temperatura płynu) ulega wyrównaniu względem przekroju poprzecznego odbiornika.

Jeżeli strumień tej substancji, wprowadzany do odbiornika, jest niezmienny w czasie, a sama substancja nie ulega przemianom, to jej stężenie w obrębie *pola dalekiego* jest stałe i może być obliczone z bilansowej relacji (6.147).

Gdy jednak strumień ten jest zmienny w czasie, wtedy poprzeczna zmienność profilu prędkości powoduje ciągłe różnicowanie stężenia. Czynnikiem ten uwzględniamy poprzez pojęcie *dyspersji masy* (rozd. 7) lub odpowiednio *dyspersji energii cieplnej* (rozd. 8). Jeżeli dodatkowo rozważana substancja może ulegać reakcjom i przemianom, to podłużne różnicowanie stężenia staje się jeszcze wyraźniejsze, intensyfikując proces dyspersji. Jest on, jak już wiemy, opisywany za pomocą członów typu dyfuzyjnego.

Istotnym mankamentem takiego modelu dla wielu przypadków jest brak możliwości dokładnego wyznaczenia warunku brzegowego w przekroju „odpływowym” (pkt 4.11.4.3, równ. (4.280)). Ponadto równania tworzące taki model, z wyjątkiem ograniczonej liczby prostych przypadków (par. 4.12.2), muszą być rozwiązywane metodami przybliżonymi, najczęściej numerycznie. Co prawda w obecnych czasach ten ostatni czynnik nie stwarza dużych trudności, lecz jeszcze kilkadziesiąt lat temu stan rzeczy wyglądał na tyle inaczej, że duże zainteresowanie budziła możliwość pomijania członów typu dyfuzyjnego. W rezultacie opracowano grupę modeli migracji zanieczyszczeń, w których człony te zostały odrzucone. Okazało się, że modele takie mają na tyle istotne zalety, że do dzisiaj celowe jest ich stosowanie w niektórych przypadkach. Z tego względu poświęcimy im w tym rozdziale nieco uwagi.

9.2. Model Streetera-Phelpsa

Mianem tym określamy pierwszy z opublikowanych (w roku 1925) modeli bezdyfuzyjnych [152]. Formalną postać tworzących go równań otrzymujemy w bardzo prosty sposób, odrzucając w ogólnym równaniu podłużnej dyspersji człon zawierający pochodną drugiego rzędu.

Ważną rolę przy konstruowaniu takiego modelu odgrywa ustalenie liczby substancji reagujących oraz/lub powstających w trakcie rozważanych procesów. Bardzo rzadko wystarcza tu rozważenie stężenia tylko jednej substancji (substratu lub produktu). Możliwe jest to wtedy, gdy właśnie ta substancja wystarczająco dobrze charakteryzuje skutki reakcji, a jej przebieg jest praktycznie niezależny od stężeń innych substancji.

W przypadku ogólnym musimy napisać tyle równań transportu, ile jest substratów i produktów łącznie. Jednakże tak rozbudowany model byłby bardzo trudny do zastosowania, a nie zawsze wszystkie składniki reakcji wywierają równie istotny wpływ na jej przebieg. W praktyce stosujemy więc modele pośrednie, w których uwzględnia się tylko niektóre substancje.

Omawiany tu klasyczny *model Streetera-Phelpsa* opisuje stężenie substancji organicznej C_o oraz stężenie C_t tlenu rozpuszczonego w wodzie odbiornika (którym jest rzeka, kanał lub inny ciek). Uwzględnia się w tym modelu tylko trzy *procesy źródłowe* – rozkład substancji organicznej (najczęściej wyrażonej jako BZT₅ wody) w wyniku działania mikroorganizmów i jednoczesny pobór tlenu z roztworu przez te mikroorganizmy (pkt 4.10.3.3) oraz proces rozpuszczania się tlenu z atmosfery w wodzie cieku (pkt 4.10.3.2). Posługując się omówionymi już w par. 4.10.3 funkcjami źródłowymi, otrzymamy następujący układ równań, tworzący model Streetera-Phelpsa:

$$\frac{\partial C_o}{\partial t} + v \frac{\partial C_o}{\partial x} = -k_{mo} C_o, \quad (9.1)$$

$$\frac{\partial C_t}{\partial t} + v \frac{\partial C_t}{\partial x} = -k_{mo} C_o + k_{dt}(C_{nt} - C_t). \quad (9.2)$$

Lewe strony tych równań wyrażają z definicji *pochodne substancjalne* stężeń C_o i C_t [134], toteż możemy je uprościć, pisząc

$$\frac{D C_o}{D t} = -k_{mo} C_o, \quad (9.3)$$

$$\frac{D C_t}{D t} = -k_{mo} C_o + k_{dt}(C_{nt} - C_t). \quad (9.4)$$

Jest to bardzo dogodnie w praktyce, gdyż dzięki takiemu zapisowi możemy zależności te traktować jako równania różniczkowe zwyczajne, uzyskując rozwiązania w funkcji czasu t . W razie potrzeby przeliczenia czasu trwania zjawiska na położenie danej porcji wody w rzece, korzystamy z *równania charakterystyk* $x(t)$, postaci [134]

$$\frac{dx}{dt} = v \quad (x = vt \text{ dla } v = \text{const}). \quad (9.5)$$

Układ powyższy utworzony jest przez równania pierwszego rzędu, toteż do jego rozwiązania potrzebujemy po jednym warunku brzegowym dla każdej z funkcji, postaci

$$t = t_o - C_{oo} = C_o(t_o), \quad C_{to} = C_t(t_o). \quad (9.6)$$

Rozwiązanie problemu możemy tu bez trudu uzyskać na drodze analitycznej. Obliczenie jednej kwadratury dla (9.3) daje

$$C_o(t) = C_{oo} \exp(-k_{mo}t) \quad (9.7)$$

Po podstawieniu tej funkcji do (9.4) mamy

$$\frac{D C_t}{D t} = -k_{mo} C_{oo} \exp(-k_{mo}t) + k_{dt}(C_{nt} - C_t). \quad (9.8)$$

Najpierw musimy rozwiązać równanie jednorodne [11]

$$\frac{D C_t}{D t} - k_{dt}(C_{nt} - C_t) = 0. \quad (9.9)$$

Proste całkowanie daje tu funkcję

$$C_{ij} = C_{nt} - F \exp(-k_{dt}t). \quad (9.10)$$

Równanie niejednorodne (9.8) rozwiążemy *metodą uziemienniania stałych*, przyjmując że w (9.10) zachodzi $F = F(t)$. Różniczkując (9.10) i podstawiając wynik do (9.8), mamy równanie opisujące nieznaną pomocniczą funkcję $F(t)$

$$\frac{D F}{D t} = k_{mo} C_{oo} \exp[(k_{dt} - k_{mo})t], \quad (9.11)$$

z którego przez kolejną kwadraturę otrzymamy

$$F(t) = \frac{k_{mo}}{k_{dt} - k_{mo}} C_{oo} \exp[(k_{dt} - k_{mo})t] + G. \quad (9.12)$$

Podstawiając tę relację do (9.10) i wyznaczając stałą całkowania G z (9.6), mamy ostatecznie

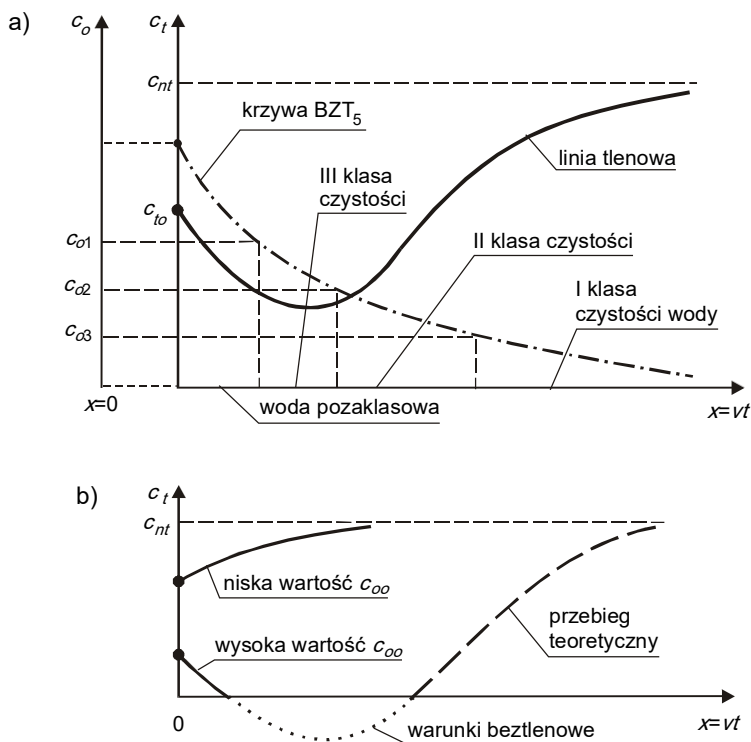
$$C_t(t) = C_{nt} - \frac{k_{mo}}{k_{dt} - k_{mo}} C_{oo} \exp(-k_{mo}t) + \left[C_{oo} \frac{k_{mo}}{k_{dt} - k_{mo}} + C_{to} - C_{nt} \right] \exp(-k_{dt}t). \quad (9.13)$$

Równania (9.7) i (9.13) są końcowymi rozwiązaniami modelu Streetera-Phelpsa. Opisują one *linię tlenową ciekłu* $C_t(t)$ oraz *krzywą BZT₅ ciekłu* $C_o(t)$. Krzywe te pozwalają na poglądowe zobrazowanie poziomu zanieczyszczenia wód odbiornika, z uwzględnieniem tak istotnego czynnika, jak warunki tlenowe wód. Typowy przebieg tych linii pokazano schematycznie na rys. 9.1.

Krzywa BZT₅ z reguły wykazuje ciągły spadek rzędnych (*samooczyszczanie odbiornika*), chyba że wzdłuż odbiornika następuje ciągły dopływ substancji organicznej (na przykład gdy płynąca z dużą prędkością woda rzeczna unosi osady denne, zawierające z reguły związki organiczne; innym przykładem może być ciągły spływ powierzchniowy lub ciągła infiltracja zanieczyszczonej wody podziemnej, zawierającej substancje organiczne).

Bardziej zróżnicowany przebieg ma linia tlenowa. W pełnej wersji może być tak, że na początkowym jej odcinku spadek stężenia tlenu jest znaczny (rys. 9.1a), lecz w miarę równoczesnego spadku stężenia substancji organicznej, intensywność zużycia tlenu maleje, a rośnie prędkość reaeracji (bowiem rośnie deficyt tlenowy, patrz (4.231)). W pewnym przekroju stężenie tlenu spada do wartości minimalnej $C_{t,min}$, a następnie zaczyna rosnać. Jed-

nakże szybkość tego wzrostu spada w miarę spadku deficytu tlenowego. W rezultacie krzywa tlenowa asymptotycznie zbliża się do wartości stężenia nasycenia C_{nt} .



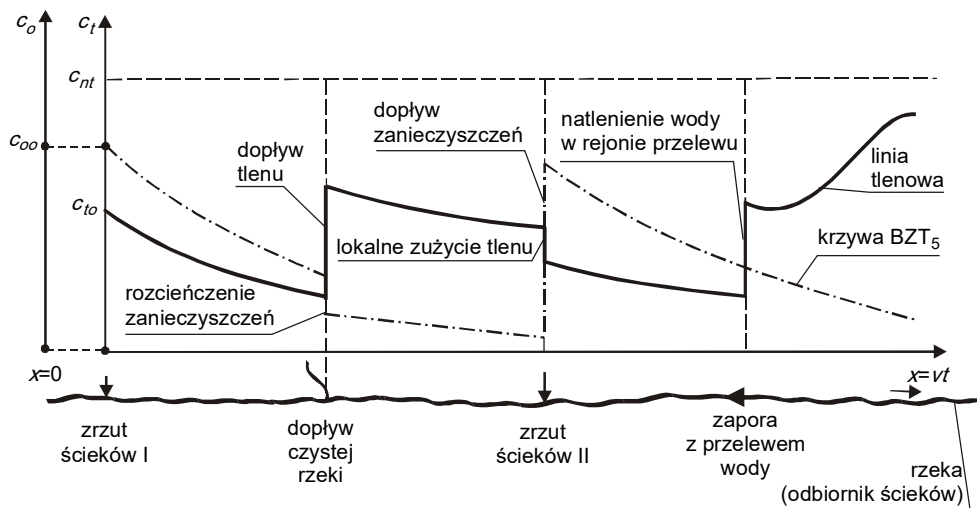
Rys. 9.1. Typowe przebiegi linii tlenowej i krzywej BZT₅ w rzece (opis w tekście)

Jednak nie zawsze krzywa tlenowa występuje w swym pełnym zakresie, jak na rys. 9.1a. Jeżeli początkowe stężenie substancji organicznej jest niskie, wtedy od samego początku możemy obserwować wzrost stężenia rozpuszczonego tlenu (rys. 9.1b). Inny zaś przebieg ma linia tlenowa, gdy początkowe zanieczyszczenie wody jest wysokie. Spadek stężenia tlenu może być wtedy tak duży, że w pewnym momencie osiągnie ono wartość zero. Omawiany tu model nie zawiera matematycznych regulatorów, uniemożliwiających pojawienie się w trakcie obliczeń ujemnych wartości stężenia (choć byłyby one sprzeczne z definicją tego pojęcia). Tak więc obliczeniowo możemy wtedy uzyskać krzywą o typowym kształcie, lecz jej część będzie przebiegała w strefie ujemnych wartości stężenia (rys. 9.1b). Praktycznie oznaczałoby to, że w wodzie pojawiają się warunki beztlenowe, co w radykalny sposób pogarsza jej warunki sanitarne. Samoczynny powrót odbiornika do warunków tlenowych (zaznaczony na rys. 9.1b linią przerywaną z dopiskiem „przebieg teoretyczny”), bez dodatkowych działań o charakterze inżynierskim, może wtedy być wręcz niemożliwy.

W praktyce technicznej występuje pojęcie *klas jakości wody*. Są one wyznaczone przez pewne krytyczne wartości wskaźników zanieczyszczenia, wprowadzane najczęściej na drodze administracyjnej. Porównanie tych wartości z przebiegami krzywych, opisujących stężenia poszczególnych substancji rozpuszczonych w wodzie, pozwala określić, do której

klasy czystości należą poszczególne odcinki rzeki. Taki przykładowy podział (dokonany tylko dla jednego wskaźnika, jakim jest BZT₅ wody) pokazano na rys. 9.1a.

Omówione wyżej prawidłowości odnoszą się do tych odcinków rzek, wzdłuż których poszczególne zmiany mają charakter ciągły. Ale w praktyce napotykamy również na sytuacje, gdy odcinki takie są przedzielane obszarami, w których na krótkim dystansie zachodzą bardzo gwałtowne zmiany parametrów zjawiska (ujścia rzek, wyloty ścieków, budowle wodne itp.). W takich przypadkach często korzystamy z modelu *źródła punktowego* (pkt 4.10.3.11, rys. 4.25), dzieląc dany odbiornik na odcinki, wzdłuż których rozważane procesy przebiegają w sposób ciągły. Zmiany lokalne traktujemy zaś jako zachodzące punktowo (rys. 9.2).



Rys. 9.2. Charakterystyka sanitarna rzeki przy użyciu modelu Streetera-Phelpsa

Istotne znaczenie dla przebiegu omawianych tu krzywych mają intensywności zachodzących procesów jednostkowych. Są one wyrażone odpowiednimi współczynnikami szybkości. Jak już wiemy (par. 4.10.3), mają one dla warunków naturalnych stosunkowo niewielkie wartości, co oznacza słabe warunki napowietrzania, czy niską intensywność mineralizacji związków organicznych. Odpowiada to *procesom samooczyszczania* wód naturalnych. Jednakże oba te procesy można znacznie przyspieszyć, docelowo uzyskując stan typowy dla *biologicznego oczyszczania ścieków*, gdy prowadzimy bardzo intensywne napowietrzanie oraz utrzymujemy wysokie stężenie mikroorganizmów w układzie.

Oczywiście, zasadnicze znaczenie ma tu stopień dokładności opisu zjawiska modelem, który w omawianym tu przypadku obciążony jest istotnym uproszczeniem, polegającym na odrzuceniu członów dyfuzyjnych. Jak zwykle w takich przypadkach, ostateczny werdykt można wydać dopiero wtedy, gdy mamy możliwość porównania wyników obliczeń modelem dokładnym, odpowiednich obliczeń modelem przybliżonym oraz (w pełnym zestawie) także rezultatów pomiarów. Jednakże w praktyce rzadko mamy taką możliwość, toteż dopuszczalność stosowania modelu Streetera-Phelpsa można wstępnie ocenić, korzystając z warunków [26]

$$v^2 \gg 200 k_{mo} K_L, \quad v^2 \gg 200 k_{dt} K_L. \quad (9.14)$$

Przykład 9.1

W miejscowości M, położonej nad Wisłą w odległości 40 km poniżej zapory we Włocławku, planuje się budowę fabryki barwników organicznych. Ma ona być wyposażona w oczyszczalnię ścieków, lecz w razie awarii systemu kanalizacyjnego należy się liczyć z czasowym odpływem do Wisły ścieków w ilości $Q_z = 30 \text{ m}^3/\text{s}$, dla których jako charakterystyczne zanieczyszczenie można przyjąć nasycone kwasy karboksylowe o stężeniu $c_z = 500 \text{ g/m}^3$. Są to substancje ulegające rozkładowi w obecności tlenu. Stała szybkości dla tego procesu jest równa $k_{kk} = 0,1 \text{ [1/d]}$. Określić przypuszczalny rozkład stężenia zanieczyszczeń oraz tlenu w rzece od przekroju zrzutowego, do jej ujścia do Bałtyku (w odległości 265 km od zapory we Włocławku), w okresie 3 dób od chwili awarii.

Rozwiązanie

Rozważany problem dotyczy odbiornika o bardzo złożonej charakterystyce, gdyż jest nim największa rzeka Polski. Przy rozwiązywaniu tego typu zadań istotne trudności sprawia wyznaczanie charakterystyki dynamicznej odbiornika – wydatku rzeki $Q(t)$ oraz jej głębokości $h(t)$.

W przypadku cieków mniejszych często stosuje się uproszczone modele przepływu. Najczęściej zakłada się, że w rzece panuje ruch ustalony i jednostajny (którego parametry opisuje wzór Chézy [134]), albo co najwyżej ruch niejednostajny, lecz ustalony, dla którego można zastosować „równanie krzywej spiętrzenia”

$$\frac{dh}{dx} = \frac{i_o - i_f}{1 - Fr^2}. \quad (9.15)$$

Jednakże w tym przypadku wykorzystanie tego typu modeli dynamicznych byłoby nadmiernym uproszczeniem, gdyż rozważany odcinek Wisły znajduje się pod wpływem zapory we Włocławku. Z tego względu wydatek rzeki i jej napelnienie należy obliczyć modelem dokładniejszym. Typowym narzędziem będą tu równania de Saint-Venanta. Jeżeli napiszemy je w postaci (7.22) i (7.23), to występującą w nich prędkość średnią v musimy przeliczyć na wydatek rzeki Q za pomocą znanej relacji [134]

$$Q = v B h. \quad (9.16)$$

Równania de Saint-Venanta musimy uzupełnić warunkami początkowymi $Q_o(x, t = 0)$ i $h_o(x, t = 0)$ oraz warunkami brzegowymi:

$$Q_L(x = 0, t) \quad \text{lub} \quad h_L(x = 0, t)$$

oraz

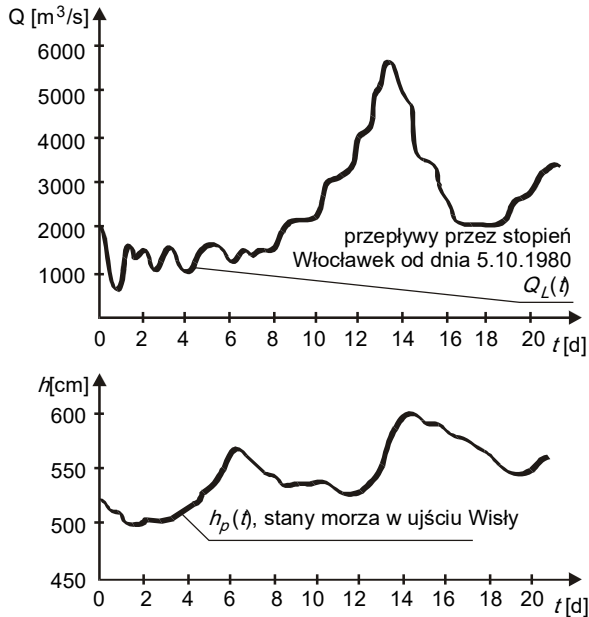
$$Q_P(x = L, t) \quad \text{lub} \quad h_P(x = L, t).$$

Warunki te nie są znane w chwili awarii, gdyż dotyczą zjawiska, które może dopiero wystąpić w przyszłości (a wcale nie musi). Z tego względu musimy bazować na *prognozach* warunków przepływu w odbiorniku. W tym konkretnym przypadku przyjęto, że w chwili początkowej w rzece panować będzie stały przepływ Q_o , równy średniemu wydatkowi z wielolecia, wyznaczony z roczników hydrologicznych. Zmianę głębokości rzeki dla tego wydatku oblicza się wtedy z równania (9.15), dla znanego w chwili awarii stanu morza w ujściu. Wszystkie informacje o korycie rzeki (spadek dna, szerokość koryta, współczynniki szorstkości) są w takim przypadku traktowane jako znane parametry obliczeniowe.

Jako warunek brzegowy dla $x = 0$ można tu przyjąć prognozę przepływu wody przez elektrownię wodną we Włocławku $Q_L(t)$. Natomiast na drugim brzegu przyjęto prognozę stanu morza w ujściu, pozwalającą na wyznaczenie funkcji $h_p(t)$.

Naszycowany wyżej schemat obliczeniowy może być traktowany jako rdzeń systemu prognostycznego, którym mogą dysponować na przykład odpowiednie służby techniczne lokalnego samorządu. W razie awarii (lub jej prawdopodobnego wystąpienia) określa się prognozy niezbędnych wielkości hydrologicznych i uruchamia system komputerowy, wyznaczający charakterystykę dynamiczną rzeki.

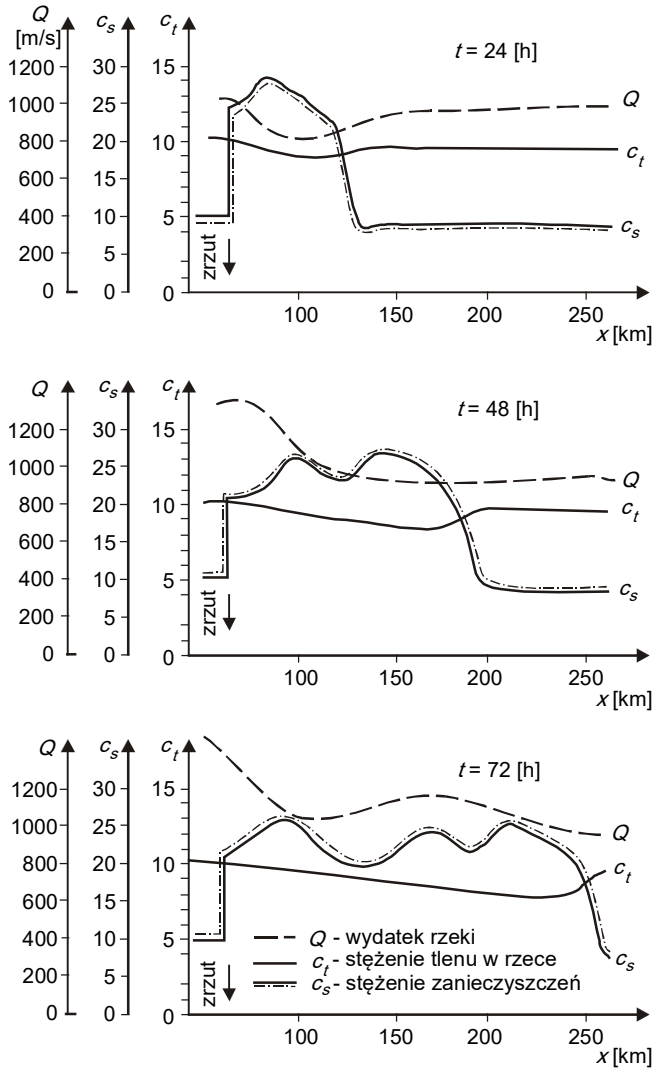
W drugiej kolejności możemy rozwiązać równania (9.3) i (9.4), opisujące już samą migrację zanieczyszczeń (w tym przypadku – według modelu bezdyfuzyjnego) i linię tlenową rzeki. Jako warunek początkowy dla rozważanej sytuacji awaryjnej można przyjąć stałe stężenia obu składników („tło”), a jako warunki brzegowe – stężenia w przekroju zrzutu, po wymieszaniu ścieków z wodami odbiornika, czyli według relacji (7.8). Numeryczne całkowanie równań transportu dla warunków dynamicznych, określonych równaniami de Saint-Venanta, daje nam poszukiwane rozwiązanie.



Rys. 9.3. Warunki brzegowe do przykładu 9.1

Konkretne rozwiązanie zaprezentowano tu dla warunków zaczerpniętych z roku 1980 [98]. Przyjęto $Q_o = 2000 \text{ m}^3/\text{s}$. Wykresy funkcji, obrazujących warunki brzegowe, pokazano na rys. 9.3, zaś rozkłady stężenia zanieczyszczeń $C_s(x)$ i stężenia tlenu $C_L(t)$, jak również zmienność wydatku – na rys. 9.4.

Jak widać z powyższego, samo wyznaczenie stężeń substancji zanieczyszczających nie jest najbardziej pracochłonną częścią zadania. Zasadniczą trudność stanowi tu konieczność określenia pola prędkości i głębokości. Ale właśnie stopień ich dokładności w ogromnym stopniu warunkuje przydatność otrzymanych wyników.



Rys. 9.4. Rozwiązanie przykładu 9.1

9.3. Ogólniejsze modele bezdyfuzyjne

Omówiony powyżej model jest stosunkowo prosty. Łatwo można go uogólnić, uwzględniając większą liczbę migrujących substancji oraz większą liczbę procesów źródłowych. Jednakże ze względu na oryginalność pierwotnej koncepcji, te ogólniejsze przypadki zaliczymy do rodziny modeli typu *Streetera-Phelpsa*, chociaż w literaturze (np. [51, 73]) używa się niekiedy dla poszczególnych przypadków określeń indywidualnych.

- Kolejnymi krokami w rozwoju relacji bezdyfuzyjnych, które warto tu odnotować, były:
- propozycja Dobbinsa [26], uwzględniająca ubytek BZT₅ wskutek sedimentacji oraz/lub adsorpcji i w efekcie spływu powierzchniowego, a dla tlenu – pobór przez osady denne i jego produkcję w wyniku fotosyntezy;
 - propozycja Campa [13], uwzględniająca możliwość wymieszania osadów dennych z wodą odbiornika, lecz pomijająca spływ powierzchniowy;
 - propozycja Hansena i Frenkela [51], w zasadzie identyczna z modelami poprzednimi, lecz wykorzystująca dokładniejszy opis przebiegu fotosyntezy;
 - propozycja O’Connora [87], w której oddzielnie opisuje się rozkład BZT₅ węglowego oraz BZT₅ azotowego.

Jednakże możliwości konstrukcji modeli typu Streetera-Phelpsa nie są niczym ograniczone, toteż kwestia powstawania nowych jest całkowicie otwarta.

10. MODELE UPROSZCZONE

10.1. Uwagi wstępne

Uproszczenia, o jakich mowa w tytule tego rozdziału, należy rozumieć jako „daleko idące uproszczenia”, bowiem w istocie rzeczy wszystkie dotychczas omówione modele procesu migracji zanieczyszczeń obciążone są pewną liczbą założeń, które pogarszają stopień zgodności każdego z nich z rzeczywistością. Tutaj omówimy te przypadki, w których wprowadzone założenia upraszczające zdominowane są przez wymogi i przesłanki techniczne, lecz które mimo to mają pewien walor ogólności, pozwalające traktować je jako odrębne klasy modeli. Nie będziemy natomiast zajmowali się tu wersjami równań o charakterze jednostkowym, które uzyskuje się indywidualnie, dla poszczególnych zagadnień, korzystając na przykład z metod omówionych w rozdz. 5. Opisy takich modeli wraz z przykładami ich aplikacji są często publikowane w literaturze technicznej.

10.2. Układy o parametrach uśrednionych w przestrzeni

W dotychczas zaprezentowanych modelach migracji masy i energii stosowaliśmy uśrednianie względem tylko części zmiennych przestrzennych (*dyspersja podłużna, dyspersja płaska, makrodyspersja w gruncie*), a jeżeli względem wszystkich trzech, to tylko lokalnie (*dyspersja filtracyjna*). Odrębną kategorię stanowi uśrednianie turbulentnych fluktuacji prędkości, gdyż dotyczy ono czasu.

Nasuwa się więc pytanie o celowość przestrzennego uśredniania zmiennych w całym układzie o objętości V , zgodnie z relacją

$$\bar{f}(t) = \frac{1}{V} \int_V f(x, y, z, t) dV. \quad (10.1)$$

Z definicji uśredniona zmienna \bar{f} jest jednakowa dla całego obszaru i może co najwyżej zmieniać się w czasie. Tak więc formułowanie tak uśrednionego modelu byłoby celowe dla takich układów, których zawartość jest bardzo silnie homogenizowana (mieszana). Posłużymy się tu pojęciem *idealnego mieszania*.

Warunki pozwalające na zastosowanie tej koncepcji mogą realnie występować w obiektach technicznych, służących do oczyszczania wody i ścieków (w *reaktorach* stosowanych w inżynierii sanitarnej). Tam bowiem stosuje się wręcz specjalne urządzenia, służące

do homogenizacji zawartości zbiornika (mieszacze, instalacje napowietrzające). W systemach naturalnych, będących głównym przedmiotem naszych zainteresowań, warunki mieszania są z reguły słabe, chyba że dodatkowo wyposażymy je w odpowiednie urządzenia techniczne (np. aeratory służące niekiedy do rekultywacji jezior). Z tego względu model, w którym zmienne zostają uśrednione w całej objętości układu, omówimy dość pobieżnie (np. [15], patrz też pkt 4.11.4.6).

Podstawowymi zależnościami będą tu oczywiście równanie zachowania masy i -tej substancji rozpuszczonej, oraz równanie zachowania energii, opisujące procesy cieplne. Pierwsze z nich otrzymamy bez trudu z ogólnej relacji całkowej (4.7). Możemy je uprościć, wprowadzając średnie stężenie c_i , stałe dla całej objętości, oraz stałą funkcję źródłową. Dzięki temu zamiast (4.7) mamy

$$\frac{d(\bar{c}_i V)}{dt} = - \int_S c_i u_{ni} dS + V \sum_{j=1}^I \bar{Z}_{ij}. \quad (10.2)$$

Cząstkową pochodną po czasie zastąpiliśmy tu pochodną zwyczajną, bowiem $\bar{c}_i = \bar{c}_i(t)$. Stosowanie tego równania w postaci całkowej byłoby kłopotliwe, gdyż wymaga opisu zmian prędkości i -tego składnika oraz jego stężenia na zewnętrznej powierzchni układu (S). Ponadto tak duża dokładność opisu zjawiska nie zawsze jest konieczna dla modelu uśrednionego według (10.1). Wprowadzamy tu więc pewne uproszczenia. Prędkość i -tego składnika \mathbf{u}_i rozkładamy zgodnie z (2.20) na prędkość barycentryczną \mathbf{u} oraz prędkość względną tego składnika \mathbf{u}_i^* . Następnie powierzchnię zewnętrzną S rozdzielamy na część S_d (przez którą następuje dopływ masy do układu) oraz część S_o (przez którą chwilowo następuje odpływ masy). Dla każdej z tych części wprowadzamy stężenie średnie: *dopływowe* \bar{c}_{di} oraz *odpływowe* \bar{c}_{oi} , które jest oczywiście równe chwilowemu stężeniu w układzie $\bar{c}_{oi} = \bar{c}_i$. Ponadto z reguły przyjmujemy, że $V = \text{const}$ (gdyż istotne zmiany objętości układu stałyby w sprzeczności z założeniem o możliwości uśredniania zmiennych względem V). Adwekcyjną część strumienia masy możemy zapisać następująco:

$$\int_S c_i u_n dS = \int_{S_d} \bar{c}_{di} u_n dS_d + \int_{S_o} \bar{c}_{oi} u_n dS_o = -\bar{c}_{di} Q + \bar{c}_i Q. \quad (10.3)$$

W przypadku ogólnym strumień masy, przemieszczający się z prędkością względną, wyrażaliśmy poprzez gradient stężenia danego składnika. W tym przypadku nie jest to możliwe, gdyż w omawianym tu modelu posługujemy się stężeniem średnim dla całego układu (toteż jego gradient byłby równy zero). Aby więc opisać strumień względny, wykorzystajmy *prawo przemieszczania masy Newtona* (pkt 4.11.4.4), co pozwala napisać

$$\int_S \bar{c}_i u_{ni}^* dS = \alpha_m (\bar{c}_{di} - \bar{c}_i) S. \quad (10.4)$$

Możemy teraz następująco wyrazić (10.2):

$$V \frac{d\bar{c}_i}{dt} = (\bar{c}_{di} - \bar{c}_i) Q + \alpha_m S (\bar{c}_{di} - \bar{c}_i) + \bar{Z}_i V. \quad (10.5)$$

W analogiczny sposób możemy wyprowadzić równanie zachowania energii dla układu uśrednionego. Punktem wyjścia jest tu relacja (4.52), wraz z kolejnymi zależnościami, sformułowanymi w par. 4.2.6. Wprowadzając do tej relacji omówione wyżej uproszczenia, mamy

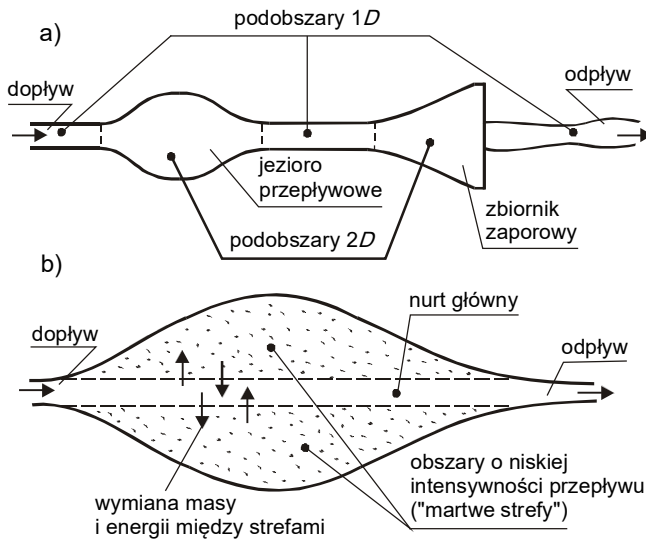
$$V \frac{d\bar{T}}{dt} = (\bar{T}_d - \bar{T})Q + \alpha_T S (\bar{T}_d - \bar{T}) + \bar{q}_{es} \quad (10.6)$$

Stosując tę zależność do opisu zjawisk termicznych w zbiornikach otwartych, musimy szczególną uwagę poświęcić wymianie ciepła przez swobodną powierzchnię. Jest ona wypadkową kilku procesów: promieniowania Słońca, atmosfery i wody, przekazywania ciepła przez konwekcję i przewodzenie oraz termicznych skutków parowania i kondensacji (np. [15]).

10.3. Model „martwych stref”

Geometryczna charakterystyka naturalnych systemów, stanowiących odbiorniki wód zanieczyszczonych, bywa bardzo złożona. Z tego względu staramy się pomijać mniej istotne elementy takiej charakterystyki. Dotychczas omówiliśmy dwie obszerne kategorie modeli uproszczonych – tych, które można stosować w przypadku *przepływów podłużnych* [134], o zmiennych uśrednionych względem przekroju poprzecznego (podrozdz. 7.2), oraz uśrednionych względem głębokości (podrozdz. 7.3) lub szerokości (podrozdz. 7.4).

Niektóre układy rzeczywiste można podzielić *granicami matematycznymi* (par. 4.11.2) na pewną liczbę podobszarów (z reguły usytuowanych naprzemiennie), które mają albo charakter zdecydowanie 1D, albo 2D (rys. 10.1a). Dla każdego z nich stosujemy model odpowiednio uśredniony, a ich wzajemne współdziałanie uwzględniamy poprzez *warunki zgodności* (pkt 4.11.4.6).



Rys. 10.1. Zasada stosowania modelu „martwych stref”

Jednakże niekiedy mamy do czynienia z taką sytuacją, że strumień cieczy, wpływający do obszaru o charakterze dwu- a nawet trójwymiarowym, nie powoduje w nim wyraźnych efektów dynamicznych. Bywa i tak, że strumień ten wytwarza własne koryto (*kinetę*, lub *nurt główny* – rys. 10.1b), które jest otoczone przez obszary o małej intensywności prze-

plywu. Niekiedy mówi się w takich sytuacjach o *przebieciu hydraulicznym* (lub o *krótkim spięciu hydraulicznym*).

W takich przypadkach możemy dla nurtu głównego zastosować model 1D, a otaczającą go *martwą strefę* potraktować jako zbiornik o uśrednionych parametrach (podrozdz. 10.2), zaś ich wzajemne oddziaływanie opisać za pomocą *prawa przejmowania masy* oraz/lub *energii Newtona* (10.4). Łącząc więc w omówiony sposób równanie jednowymiarowej dyspersji (7.63) z modelem (10.5), w przypadku substancji trwałej, przy stałym przekroju koryta, mamy

$$\frac{\partial \tilde{c}_i}{\partial t} + v \frac{\partial \tilde{c}_i}{\partial x} = K_L \frac{\partial^2 \tilde{c}_i}{\partial x^2} + \alpha_M (\tilde{c}_{Msi} - \tilde{c}_i), \quad (10.7)$$

$$\frac{\partial \tilde{c}_{Msi}}{\partial t} = -\alpha_M (\tilde{c}_{Msi} - \tilde{c}_i). \quad (10.8)$$

Uwzględnienie rozbudowanych przestrzennie partii koryta strumienia, przy zastosowaniu wyżej omówionej metody, może w istotnym stopniu poprawić dokładność modelu [21].

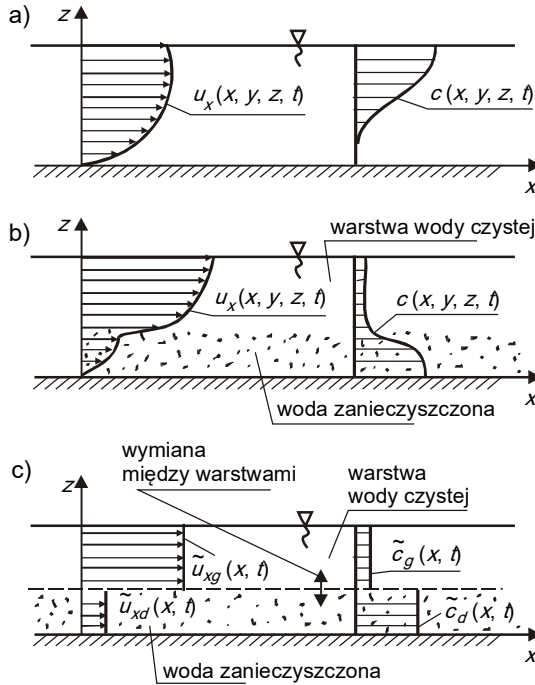
10.4. Modele stratyfikowane

O modelach tego typu wstępnie wspomnieliśmy w punkcie 4.11.4.6. Wykazuje on pokrewieństwo z dwoma poprzednio omówionymi przypadkami, gdyż operuje się w nim pewnymi oddzielnymi podobszarami, a oddziaływanie między nimi opisywane jest prawem Newtona (4.288).

Dotychczasowe rozważania dobitnie pokazują, że przestrzenna zmienność wielkości fizycznych jest istotną trudnością przy formułowaniu i rozwiązywaniu problemów praktycznych. Przy ich podejmowaniu należy więc każdorazowo starannie rozważyć istniejące możliwości wprowadzenia uproszczeń, systematycznie analizując poszczególne aspekty tych zadań (podrozdz. 5.1).

Wiele praktycznych problemów inżynierii środowiska można rozwiązać za pomocą modelu uśrednionego względem kierunku pionowego (podrozdz. 7.3). Jest on dopuszczalny wtedy, gdy pola zmiennych mogą być opisane funkcjami dwóch zmiennych przestrzennych, a pole prędkości ma charakter *dwukierunkowy*. Jednakże często może być tak, że choć wektor prędkości ma rzeczywiście tylko dwie niezerowe składowe, to uwzględnić musimy trójwymiarowy charakter zjawiska (rys. 10.2a). W części takich przypadków zmiana wielkości fizycznych ma charakter niejednorodny (rys. 10.2b). Można wtedy podzielić obszar na oddzielne warstwy. Z reguły są one poziome, gdyż w procesie stratyfikacji często zasadniczą rolę odgrywa grawitacja ziemiska (na przykład odkładanie warstwy osadów na dnie zbiornika wodnego), choć w ogólności można też rozważać stratyfikację o dowolnej orientacji warstw. Dla każdej z takich warstw piszemy osobno równania o zmiennych uśrednionych względem jej grubości, a wzajemne ich oddziaływanie opisujemy relacjami typu (4.288).

Liczba warstw nie jest ograniczona, toteż można za pomocą omawianego tu modelu opisywać także przypadki o jednorodnej zmienności parametrów (rys. 10.2a). Prowadzi to do rozwiązania, które można nazwać „quasi-trójwymiarowym” (uwzględnia ono pionową zmienność wielkości fizycznych, lecz czynnik ten jest opisywany z mniejszą dokładnością niż zmienność w kierunkach poziomych).



Rys. 10.2. Schematy zagadnień (a – o jednostajnej zmienności parametrów, b – o zróżnicowanej zmienności parametrów, c – model „stratyfikowany”)

Podkreślić też trzeba, że czym innym jest uproszczony model przepływu stratyfikowanego (gdzie powierzchnia rozdziału zastępuje warstwę o gwałtownej zmienności parametru, który w rzeczywistości ma charakter ciągły), a czym innym realny przepływ dwu- lub wielowarstwowy, odnoszący się do płynów, które się wzajemnie nie mieszają (choć od strony formalnej opisy w obu modelach bazują na tych samych zasadach).

10.5. Algebraiczne metody opisu migracji zanieczyszczeń

10.5.1. Uwagi wstępne

Użyty w tytule termin „algebraiczne” dotyczy formy tych modeli. Są one wyrażane zależnościami właśnie typu algebraicznego, bez konieczności stosowania zapisu różniczkowego. Z natury rzeczy należą więc one do kategorii metod o wysokim stopniu uproszczenia. Część z nich bazuje na omówionych już analitycznych rozwiązaniach równań migracji (par. 4.12.2), a niektóre mają charakter empiryczny. Szczególną rację bytu miały te metody w okresie przed upowszechnieniem metod komputerowych, więc ich obecna przydatność jest ograniczona. Jednakże nie można jej całkowicie wykluczyć, a ponadto są one pouczającym przykładem różnych sposobów opisu zjawiska migracji. Z tego względu celowe jest omówienie tu kilku z nich.

10.5.2. Przypadek jednowymiarowy

Jak już wiemy (rozdz. 9), w obrębie pola dalekiego (rys. 6.16) możemy zastosować model typu Streetera-Phelpsa. Jeżeli długość pola bliskiego L_M jest w rozważanym przypadku niewielka, wtedy możemy jego istnienie pominąć. Gdy jednak wartość L_M jest znaczna, musimy rozwiązać równania opisujące mieszanie burzliwe (rozdz. 6). Przedstawiona poniżej metoda [76, 173] bazuje na wykładniczym rozwiązaniu tego równania, które w prostym przypadku uzyskujemy w postaci analitycznej (par. 4.12.2).

W pierwszej kolejności wyznaczamy skalarny współczynnik dyfuzji burzliwej, korzystając z relacji typu (6.67). Gdy rozważamy rzekę typu nizinnego, dzielimy jej koryto (o łącznej długości L) na N odcinków o długości L_n każdy. Warunki ruchu dla danego odcinka muszą być jednakowe. Współczynnik dyfuzji obliczamy ze wzoru

$$D_T = \sum_{n=1}^N \frac{L_n v_n h_n}{200 L}. \quad (10.9)$$

W przypadku rzek pozostałych (które nie mają charakteru nizinnego) korzystamy ze wzoru

$$D_T = 0,22 n_s v h, \quad (10.10)$$

gdzie n_s jest współczynnikiem szorstkości, pokrewnym współczynnikowi Manninga (tablica 13).

Następnie obliczamy współczynnik pomocniczy, który określa hydrauliczne warunki mieszania ścieków z wodą odbiornika

$$\alpha_{WM} = \xi_w \varphi_w (D_T / Q_s)^{1/3}, \quad (10.11)$$

gdzie dla wylotu brzegowego $\xi_w = 1,0$, a dla wylotu dennego $\xi_w = 1,5$, zaś bezwymiarowy iloraz

$$\varphi_w = L / L_p \quad (10.12)$$

jest stosunkiem długości rzeki L , liczonej wzdłuż jej biegu, do długości L_p , liczonej w linii prostej między jej końcowymi przekrojami.

Współczynnik α_{WM} przeliczamy na współczynnik β_{WM}

$$\beta_{WM} = [\exp(\alpha_{WM} L^{1/3})]^{-1}. \quad (10.13)$$

Jako parametr dodatkowy możemy wyznaczyć stopień wymieszania ścieków z wodą odbiornika n_R , dla przekroju obliczeniowego odległego o L od wylotu ścieków. Korzystamy tu ze wzoru

$$n_R = \frac{1 - \beta_{WM}}{1 + Q\beta_{WM}/Q_s}. \quad (10.14)$$

Można też zamiennie posłużyć się pojęciem stopnia rozcieńczenia ścieków

$$S_R = \frac{n_R Q + Q_s}{Q_s}. \quad (10.15)$$

Maksymalne stężenie rozważanego składnika zanieczyszczenia c_L w przekroju $x = L$ obliczamy ze wzoru

$$c_L = c_K + (c_S - c_W) / \beta_{WM}, \quad (10.16)$$

gdzie: c_K – stężenie składnika w punkcie pełnego wymieszania (wzór 6.147), c_S – jego stężenie w zrzucanych ściekach, c_W – stężenie składnika w wodzie odbiornika przed zrzutem („tło”). Za punkt pełnego wymieszania przyjmuje się przekrój rzeki, położony w odległości L_W od wylotu ścieków, gdzie

$$L_W = \left[\frac{2,3}{\alpha_{WM}} \log \left(\frac{S_R}{1 - S_R} \right) \right]^3. \quad (10.17)$$

10.5.3. Zbiorniki wodne

Wyloty kanalizacyjne w zbiornikach sytuowane są najczęściej w rejonie dna (par. 6.5.4, rys. 6.15). Średni rozkład stężenia – zawartych w ściekach zanieczyszczeń – między wylotem a swobodną powierzchnią wody w odbiorniku można obliczyć ze wzorów:

— gdy różnica gęstości ścieków i wody jest pomijalna (d_w – średnica rury wylotowej)

$$c(z) = 5,6 c_S \frac{d_w}{z}, \quad (10.18)$$

— gdy różnica gęstości ścieków i wody jest znaczna

$$c(z) = \left(5,6 c_S \frac{d_w}{z} \right) \left[1 + 0,22 \left(\frac{z}{d_w \text{Fr}} \right)^2 \right]^{-1/3}, \quad (10.19)$$

gdzie *gęstościowa liczba Froude'a* określona jest wzorem

$$\text{Fr} = \frac{4Q_s}{\pi d_w^2 \left(\frac{\rho - \rho_s}{\rho_s} g d_w \right)^{1/2}}. \quad (10.20)$$

Dalszy burzliwy transport zanieczyszczeń (po przybliżonym obliczeniu stężenia w strefie pionowego wypływu strumienia, zgodnie z powyższymi wzorami) możemy opisać równaniami dokładnymi (rozd. 6), albo uproszczoną metodą Ruffela [76]. Jej podstawą są dwie zależności, określające zmianę stopnia rozcieńczenia ścieków $S_R(x)$, od wartości początkowej S_{RO} , dla zbiornika o średniej głębokości w pobliżu wylotu równej h . Dla *wylotów przybrzeżnych* mamy

$$S_R(x) = S_{RO} \left[1 + 0,412 (x/h_s)^{0,627+0,0002 x/h_s} \right], \quad (10.21)$$

gdzie

$$h_s = 6,53 h^{1,167} \quad (h \text{ [m]}, h_s \text{ [m]}), \quad (10.22)$$

natomiast w przypadku *wylotów głębokowodnych* piszemy

$$S_R(x) = S_{RO} \left[1,85 + 2,32 (x/h_s)^{0,41+0,0064 x/h_s} \right], \quad (10.23)$$

gdzie

$$h_s = 4,41 h^{1,167} \quad (h \text{ [m]}, h_s \text{ [m]}). \quad (10.24)$$

Gdy wody odbiornika płyną z prędkością v , wtedy początkowe rozcieńczenie określa wzór

$$S_{RO} = \frac{Q_s + 0,111h^2v}{Q_s + 0,111v c_w/c_s}, \quad (10.25)$$

gdy zaś są one nieruchome ($v = 0$), to

$$S_{RO} = \frac{Q_s + 0,0087 h^2}{Q_s + 0,000435 h^2} \quad (10.26)$$

10.5.4. Atmosfera ziemska

W ujęciu skróconym możemy ograniczyć się do wyznaczenia maksymalnego stężenia zanieczyszczeń gazowych na powierzchni terenu, które określa wzór [17]

$$c_{t,max} = 0,235 \frac{E_s D_{LV}}{w H_w^2 D_{LH}}. \quad (10.27)$$

Symbol E_s oznacza tu *emisję zanieczyszczeń* (masowe natężenie ich wypływu ze źródła, jakim jest np. komin), w jest prędkością wiatru, H_w – efektywną wysokością wylotu nad powierzchnią terenu (z uwzględnieniem *wysokości wyniesienia* (6.146), rys. 6.17), zaś D_{LV} i D_{LM} – współczynnikami dyfuzji atmosferycznej (tablica 14). Wartości tych współczynników uzależnione są od tak zwanego *wykładnika meteorologicznego* ω_M . Określa go prędkość wiatru (na wysokości 16,0 m nad powierzchnią terenu) oraz średni pionowy gradient temperatury g_T (tablica 15).

Wartości H_w oraz ω_M pozwalają obliczyć odległość $L_{t,max}$ od źródła emisji, w której występuje maksymalne stężenie $c_{t,max}$ według (10.27)

$$L_{t,max} = \left(\frac{H_w}{D_{LV}} \right)^{\frac{2}{2-\omega_M}}. \quad (10.28)$$

Dokładniejszą charakterystykę stężenia zanieczyszczeń w rejonie komin można wyznaczyć, posługując się *metodą Pasquilla* [17]. Jej podstawę stanowi analityczne rozwiązanie równania ustalonej adwekcji-dyfuzji (par. 6.5.2), do którego wprowadzono pewne czynniki o charakterze empirycznym. Rozwiązanie to ma postać

$$c(x, y, z) = \frac{E_s}{2\pi \tilde{w} D_{LM} D_{LV}} \exp\left(-\frac{y^2}{2D_{LH}^2}\right) \cdot \left\{ \exp\left[-\frac{(z-H_w)^2}{2D_{LV}^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H_w)^2}{2D_{LH}^2}\right] \right\}. \quad (10.29)$$

Układ współrzędnych zorientowany jest tu jak na rys. 6.13. Źródło emisji (wylot komin) usytuowane jest w punkcie o współrzędnych $(0, 0, H_w)$. Przyjmuje się, że podłoże nie reaguje z zanieczyszczeniami, a ich stężenie w nieskończonej odległości od kominą dąży do zera.

Wartość \tilde{w} oznacza średnią prędkość wiatru od powierzchni terenu do wylotu. Zakłada się tu, że pionowy rozkład prędkości wiatru $w(z)$ określony jest funkcją wykładniczą

$$w(z) = w_a (z/h_a)^{m_w}, \quad (10.30)$$

gdzie w_a oznacza prędkość wiatru na znanej wysokości h_a (często $h_a = 10,0$ m), zaś m_w również nosi nazwę *wykładnika meteorologicznego*, lecz różni się on od ω_M (według tabeli 15), a jest uzależniony od *stanu równowagi atmosfery*. Stanów takich jest 6 i określone są kolejnymi przedziałami prędkości wiatru: 3 m/s, 5 m/s, 7 m/s, 9 m/s oraz 11 m/s. Dla każdego z tych stanów mamy kolejno [17]:

$$m_w = 0,080; 0,143; 0,196; 0,270; 0,363; 0,440.$$

Uwzględniając powyższe, możemy obliczyć średnią prędkość wiatru ze wzoru

$$\tilde{w} = \frac{w_a}{m_w + 1} \left(\frac{H_w}{h_a} \right)^{m_w}. \quad (10.31)$$

Występujące w (10.29) symbole D_{LH} i D_{LV} noszą miana współczynników dyfuzji turbulentnej (odpowiednio w kierunkach y oraz z), jednakże mają one tutaj charakter raczej umowny i czysto empiryczny, a wyrażane są w jednostkach wymiaru liniowego. Określają je wzory

$$D_{LH} = A_H x^a, \quad D_{LV} = A_V x^b. \quad (10.32)$$

Wykładniki potęg a i b są funkcjami wykładnika meteorologicznego m_w , zgodnie z zależnościami:

$$a = 0,367(2,5 - m_w), \quad b = 1,55 \exp(-2,35m_w), \quad (10.33)$$

zaś stałe mnożniki opisują następujące wzory:

$$A_H = 0,08 \left[6m_w^{-0,3} + 1 - \ln \left(\frac{H_w}{z_s} \right) \right] \quad (10.34)$$

$$A_V = 0,38 m_w^{1,3} \left[8,7 - \ln \left(\frac{H_w}{z_s} \right) \right]. \quad (10.35)$$

Wartość z_s jest tu miarą bezwzględnej szorstkości podłoża. Jest ona równa 10% średniej wysokości elementów pokrycia terenu (czyli jest rzędu kilku milimetrów dla powierzchni gładkich, zaś do 5,0 m dla centrów dużych miast).

Stosowanie *metody Pasquilla* polega na wyznaczaniu rozkładu stężenia według (10.29) dla istniejącego emitora i analizie wyników obliczeń pod kątem zasad ochrony środowiska, lub też na takim doborze lokalizacji źródła emisji, aby rozkład zanieczyszczeń był możliwie mało szkodliwy dla otoczenia.

Część III

METODA STRUKTURALNA

11. CHARAKTERYSTYKA METODY

11.1. Podstawowe koncepcje

Zasadę *metody strukturalnej* w głównych zarysach przedstawiliśmy w podrozdz. 3.3. Stosujemy ją do opisu ruchu substancji rozproszonej w płynie, tworzącej układ złożony wielofazowy, czyli *zawiesinę* (par. 2.1.8, tabl. 2). Z reguły będzie to układ *niejednorodny* (budowa chemiczna cząstek zawiesiny różni się od budowy chemicznej płynu nośnego), choć nasze rozważania będą ważne także dla zawiesin *jednorodnych* (np. dla ruchu kryształków lodu w wodzie, który niekiedy jest brany pod uwagę przy analizie zjawisk lodowych w wodach naturalnych). Jednakże w takim przypadku substancja rozproszona nie ma charakteru zanieczyszczenia.

Ze względu na rozmiary cząstek, które są nieporównanie większe od molekuł płynu rozpraszającego w przypadku *zawiesin makroskopowych*, zaś dużo od nich większe w przypadku *zawiesin koloidalnych*, oddziaływanie między molekułami nośnika a substancją zawieszoną ma zupełnie inny charakter, niż w przypadku roztworów. Oddziaływanie to jest wypadkową czynników, występujących na powierzchni międzyfazowej. Tym samym nie możemy w ścisłym ujęciu potraktować zawiesiny jako ośrodka ciągłego, nawet jeśli spełniony jest warunek (2.9). I choć w zastosowaniach zachowanie niektórych typów zawiesiny jednak opisuje się metodą fenomenologiczną (patrz rozdz. 16), to jest to dopuszczalne dopiero dzięki wnioskowi, jakie wyciągamy z metody strukturalnej.

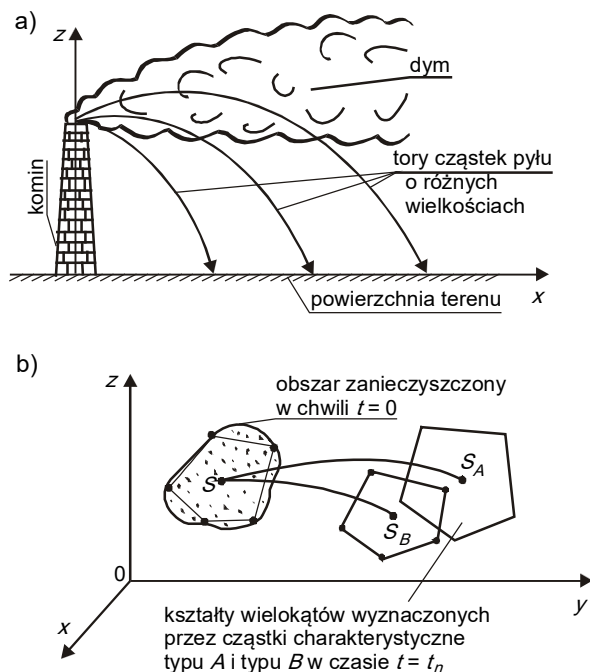
Tak więc w dalszym ciągu będziemy ruch zawiesiny opisywali poprzez ruch tworzących ją cząstek. Oczywiście, ze względu na ogromną ich liczbę w układach rzeczywistych, nie będziemy opisywać zachowania każdej z nich, lecz tylko ruch cząstek wybranych jako *charakterystyczne* (rys. 3.1).

Wybór cząstki charakterystycznej musi uwzględniać dwie kategorie czynników, wpływających na ruch cząstki. Z jednej bowiem strony określają go *fizyczne własności cząstek*, a z drugiej – ich *położenia początkowe*. Pierwszy z tych czynników omówimy w par. 11.2.2, zaś drugi – ilustruje rys. 11.1.

Możemy mieć więc do czynienia z taką sytuacją, że strumień zawiesiny emitowany jest do odbiornika w postaci bardzo zwartej (np. komin, wylot kanalizacyjny). Przyjmujemy wtedy, że wylot ten ma charakter punktowy (*emisja punktowa*), a dopiero w trakcie ruchu cząstki o różnych własnościach dynamicznych różnicują swe położenie, poruszając się po różnych trajektoriach (np. cząstki typu A, B i C na rys. 11.1a).

Drugim typem stanu początkowego jest pojawienie się dla czasu $t = 0$ pewnej „chmury” płynu zanieczyszczonego zawiesiną. Jej kształt możemy opisać z różną dokładnością.

Najprościej jest posłużyć się jej środkiem ciężkości S (rys. 11.1b). W chwili początkowej jest on wspólny dla wszystkich typów cząstek zawiesiny, lecz z upływem czasu ulega zróżnicowaniu (S_A i S_B na rys. 11.1b). Lepszym jednak rozwiązaniem będzie określenie początkowego kształtu obszaru zanieczyszczonego przez opis jego obwodu pewną linią łamaną. Na rys. 11.1b wyznaczają ją przykładowo 5 punktów (zaznaczono tam też położenia charakterystycznego wielokąta dla dwóch typów cząstek, po czasie Δt).



Rys. 11.1. Zasada wyboru początkowych położenia cząstek charakterystycznych

Kształt trajektorii każdej z cząstek charakterystycznych opisany jest promieniem wodzącym (3.1). Te same argumenty określają też własności fizyczne cząstek (3.2), o ile oczywiście ulegają one w trakcie ruchu zmianom. Konkretnie funkcje (3.1) wyznaczamy z równań, które wyprowadzimy z praw fizycznych, rządzących ruchem cząstek (rozdz. 12).

Rzecz oczywista, omawiana tu metoda dotyczy wyłącznie zanieczyszczeń materialnych. Proces przenoszenia energii cieplnej z natury rzeczy opisać można tylko *metodą fenomenologiczną*, którą przedstawił w poprzednich rozdziałach tej pracy.

Podkreślimy jeszcze, że w tej części rozprawy przedstawimy *metodę strukturalną* w jej wersji podstawowej. Jak zobaczymy dalej, możliwość jej stosowania ogranicza się do tych przypadków, gdy cząstki zawiesiny wprowadzane są do płynu, wypełniającego odbiornik zanieczyszczeń. Jest to wersja wystarczająca do rozwiązania zasadniczych problemów w inżynierii i ochronie środowiska, lecz w praktyce napotkać można szereg zadań, których wyprowadzone niżej zależności nie opisują. W szczególności dotyczy to procesów podnoszenia i wprowadzania w ruch osadów przez poruszający się płyn. Jednak problemy tego typu w mniejszym stopniu odnoszą się do zadań migracji zanieczyszczeń, a raczej pojawiają się w innych działach nauk technicznych i przyrodniczych, jak przemysł chemiczny, spo-

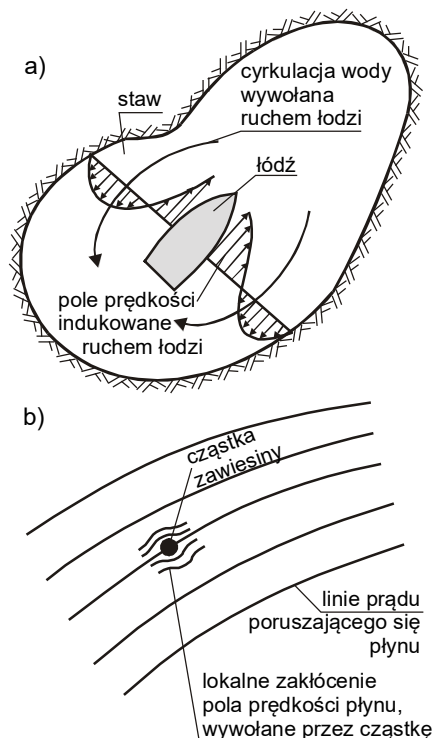
żywczy i farmaceutyczny, ciepłownictwo, transport hydrauliczny, czy hydrotechnika (np. [2, 89, 92, 94]).

11.2. Fizyczne własności zawiesin

11.2.1. Charakterystyka zawiesiny jako całości

W podrozdz. 2.2 omówione zostały *bazowe wielkości fizyczne*, cechujące układy niejednorodne. W ujęciu ogólnym odnoszą się one zarówno do *roztworów*, jak i do *zawiesin*, jednakże dla każdej z tych kategorii wykazują pewną specyfikę, którą musimy tu sprecyzować.

Do najważniejszych wielkości w mechanice należy *prędkość*. Gdy rozważany układ traktujemy jako ciągły (metoda fenomenologiczna), wtedy definiujemy jedną funkcję u_b , która jest jedną dla całego układu *prędkością barycentryczną* (2.18). W praktyce z reguły pomijamy wpływ substancji rozproszonej na ruch, posługując się prędkością płynu nośnego (4.196). W ten sposób wprowadzamy *prędkość adwekcji* u . Różnica między prędkością *i-tej* fazy a prędkością adwekcji, czyli *prędkość względna* (2.20), ma kluczowe znaczenie dla opisu transportu substancji rozproszonej. W przypadku roztworów określa ona *prędkość dyfuzji* i jest wyrażana przez gradient stężenia, w postaci *prawa Ficka* (4.84).



Rys. 11.2. Wpływ ruchu ciała lub cząstki na pole prędkości płynu nośnego

Inaczej rzecz się ma w przypadku zawiesin. Chaotycznym ruchom molekuł rozpuszczalnika podlegają jedynie cząstki *koloidalne*, a i to w bardzo ograniczonym zakresie (*ruchy Browna* – patrz podrozdz. 15.2). Cząstki *makroskopowe* przemieszczają się natomiast względem nośnika pod działaniem siły ciężkości (*sedymentacja* lub *flotacja* – par. 2.1.8). Ruch taki nie ma charakteru chaotycznej fluktuacji, a w dodatku może wpływać na ruch nośnika. Wpływ ten jest uzależniony od wielkości cząstki oraz od wielkości układu. W przypadkach niewielkiej różnicy obu tych wielkości (gdy zamiast słowa „cząstka” będziemy raczej mówili „ciało, poruszające się w cieczy”), pole prędkości generowane przez to ciało może mieć zasadnicze znaczenie dla przebiegu zjawiska. Przykładowo, ruch łodzi na powierzchni niewielkiego stawu może być jedynym czynnikiem, wywołującym ruch wody (rys. 11.2a). Z kolei ruch drobnej cząstki zawiesiny indukuje zakłócenie pola prędkości (rys. 11.2b), które ma znaczenie lokalne.

Gdy jednak liczba cząstek zawiesiny w układzie jest znaczna, to odległości między nimi będą niewielkie i poszczególne lokalne zakłócenia prędkości mogą ulegać interferencji, w istotny sposób wpływając na ruch całego układu. Najpierw jednak zajmiemy się przypadkiem podstawowym, gdy poszczególne cząstki nie wpływają na siebie (rozdz. 12), a dopiero w drugiej kolejności (rozdz. 15) omówimy ich wzajemne oddziaływanie.

Kolejna z bazowych wielkości fizycznych, *ciśnienie*, jest definiowane dla ośrodków ciągłych. Jeżeli więc w metodzie strukturalnej cząstki zawiesiny traktujemy jako odrębne ciała, to możemy jedynie rozważać ich wpływ na rozkład ciśnienia w płynie nośnym (pkt 12.2.2.4).

Gęstość zawiesiny oraz *stężenie* każdej z frakcji możemy określać przy pomocy relacji omówionych w par. 2.2.6. W metodzie strukturalnej wielkości te mają jednak charakter pomocniczy, gdyż (rys. 11.1) podstawowym narzędziem pracy jest tu aktualna konfiguracja cząstek zawiesiny.

Zmiany ostatniej z wielkości bazowych, *temperatury* zawiesiny, podlegają podobnym czynnikom, jak temperatura płynu filtrującego przez ośrodek porowaty (podrozdz. 8.5). Jeśli różnice temperatur oraz prędkości między nośnikiem a cząstkami zawiesiny są znaczne, to wzajemna wymiana ciepła między nimi może być istotna (na przykład podczas chłodzenia soku ziarenkami pokruszonego lodu). W zagadnieniach migracji zanieczyszczeń kwestia ta nie ma jednak większego znaczenia.

11.2.2. Charakterystyka cząstek zawiesiny

11.2.2.1. Rodzaje zawiesin. Podstawowe typy *układów złożonych rozproszonych* zdefiniowaliśmy już w par. 2.1.8, wyróżniając tam zawiesiny *koloidalne* oraz *makroskopowe*. Wyróżnikiem ilościowym jest dla nich przeciętny rozmiar cząstek (rzędu 10^{-6} m), zaś jakościowym – możliwość poruszania się pod wpływem siły ciężkości (cechująca cząstki makroskopowe), lub jej brak (koloidy). Miejsce tych układów wśród *makroskopowych zbiorów drobin* obrazuje też rys. 2.3, zaś możliwe kombinacje ich składników – tabela 2.

11.2.2.2. Kształt i struktura cząstek. Możemy napotkać bardzo zróżnicowane kształty cząstek. Zależą one od sposobu ich powstawania oraz od budowy chemicznej tworzącego je materiału.

Dokładne opisywanie tego kształtu jest uzasadnione tylko wtedy, gdy cząstki są regularne. W praktyce dotyczy to cząstek powstających w procesach technicznych. Gdy rozdrobnienie materiału następuje na drodze naturalnej, w przyrodzie, cząstki są nieregularne,

toteż opisujemy je w sposób *przybliżony*, posługując się takimi terminami, jak: kulista, czworościenna, płaska, blaszkowata itp.

Kształt cząstki może ulegać zmianom w czasie jej ruchu. Materiał stały może pod działaniem czynników mechanicznych (uderzanie, ścieranie), fizycznych (zamarzanie, roztopianie) oraz chemicznych (utlenianie) ulegać rozdrabnianiu. Proces taki nazywamy *rozmywalnością*. Warunkuje ją twardość materiału. Im twardsza jest cząstka, tym trudniej ją rozdrobnić, a jednocześnie tym bardziej wpływa ona na erozję powierzchni, ograniczających przepływ (ścianek rurociągu, dna i brzegów rzeki, kadłuba pompy itp.).

Cząstki zawiesiny mogą też łączyć się ze sobą, zachowując swój początkowy kształt (np. przy łączeniu się kulistych kropeł oleju w wodzie), lub zmieniając go (np. przyjmując postać włóknistych kłaczków w wyniku koagulacji, lub nieregularnych aglomeratów, powstających w trakcie flotacji).

Istotny wpływ na kształt cząstek może mieć ich *deformacja* podczas ruchu w płynie. W szczególności dotyczy to pęcherzyków gazu, które do objętości 0,015 cm³ mogą być traktowane jako kule, do objętości 0,3 cm³ mają kształt elipsoidy, zaś powyżej – przyjmują postać spłaszczonej czaszy [100].

Część substancji może wypełniać cząstki zawiesin w sposób *jednolity*, toteż traktujemy je jako ciągłe. Jednak niekiedy obserwujemy cząstki, zbudowane z drobin materiału stałego, między którymi znajdują się wolne przestrzenie, zwane *porami* (np. drobinny cegły, koksu, porcelany itp.). Wyróżniamy *pory otwarte* (dostępne z zewnątrz) i *pory zamknięte* (nie dostępne z zewnątrz).

11.2.2.3. Powierzchnia cząstki. Jeżeli rozważamy zjawiska międzyfazowe (np. chemiczne, czy elektrostatyczne), to interesuje nas całkowita zewnętrzna powierzchnia cząstki (łącznie z powierzchnią porów otwartych), kontaktująca się z substancją, otaczającą tę cząstkę. Nazywamy ją *powierzchnią statyczną* (lub *adsorpcyjną*).

Jednakże gdy cząstka się porusza, to siły adhezji i lepkości różnicują zachowanie się otaczającego ją płynu. Mianowicie, płyn wypełniający pory porusza się niemal identycznie z cząstką, podczas gdy płyn zewnętrzny – opływa ją. Logiczne jest więc wprowadzenie pojęcia *powierzchni kinetycznej* (lub *zewnętrznej*), która otacza cząstkę wraz z porami. Oczywiście, dla cząstek jednorodnych obie powierzchnie, statyczna i kinetyczna, są tożsame.

Osobnym pojęciem jest *powierzchnia czynna* F_c . Definiujemy ją jako pole powierzchni rzutu cząstki na płaszczyznę prostopadłą do wektora jej prędkości względem płynu. W przypadku cząstki kulistej, jej powierzchnia czynna jest zawsze kołem, ale dla innych cząstek zależy od ich orientacji względem kierunku ruchu (np. dla cząstki elipsoidalnej powierzchnia czynna może być zarówno kołem, jak i elipsą). Pojęcie to ma znaczenie przy wyprowadzaniu wzoru, opisującego *siłę oporu* (patrz pkt 12.2.2.7).

11.2.2.4. Objętość i porowatość cząstki. Omówione powyżej dwa typy zewnętrznych powierzchni cząstek otaczają dwa typy ich objętości – odpowiednio *objętość statyczną* V_a oraz *objętość kinetyczną* V_c . Ponadto, jeśli chcemy wyróżnić ewentualnie istniejące *pory zamknięte*, możemy mówić o *objętości materiału cząstki* V_m . Względny udział porów w objętości całej cząstki określa jej *porowatość*

$$n_c = (V_c - V_a)/V_c. \quad (11.1)$$

11.2.2.5. Wilgotność cząstki. Termin ten określa względny udział cieczy (najczęściej wody, ale także możemy go używać w przypadku benzyny, spirytusu itd.) w masie lub w objętości cząstki.

Mamy trzy główne rodzaje powiązań cieczy z innymi substancjami:

- 1) chemiczne (wskutek reakcji między molekułami),
- 2) fizykochemiczne (w rezultacie adsorpcji i osmozy),
- 3) mechaniczne (w efekcie procesów powierzchniowych, adhezji, działania sił kapilarnych).

Zawartość cieczy w cząstce można rozważać w różnych aspektach. Dla nas celowe jest wyróżnienie *wilgoci związanej* (jej usunięcie wymaga dostarczenia energii cieplnej, w znacznej ilości, która niekiedy może zagrażać trwałości cząstki) oraz *wilgoci swobodnej* (którą można usunąć w temperaturze niewiele wyższej od temperatury otoczenia). W szczególności interesować nas będzie ta część cieczy (o masie M_w), związanej z cząstką, która wpływa na jej ruch. Przykładem może tu być woda, wypełniająca pory cząstki, lub para wodna, znajdująca się w pęcherzyku powietrza, przemieszczającym się przez warstwę cieczy.

Parametrem ilościowym, określającym omawiany czynnik, jest *wilgotność cząstki*. Najczęściej ją wyrażamy jako stosunek masy cieczy do masy całej cząstki

$$x_{wc} = M_w/M_c. \quad (11.2)$$

11.2.2.6. Gęstość cząstki. Przy opisywaniu ruchu poszczególnych cząstek zawiesiny, traktujemy je jako punkty materialne, toteż bardzo rzadko rozważamy ich wewnętrzną strukturę. Tym samym *gęstość* takiej cząstki będzie miała charakter wielkości średniej. Ze względu na to, że powyżej (pkt 11.2.2.4) zdefiniowaliśmy trzy miary objętości cząstki, konsekwentnie musimy pamiętać o istnieniu trzech możliwych gęstości takiego obiektu, którymi są:

- 1) *gęstość materiału cząstki*

$$\rho_m = M_c/V_m, \quad (11.3)$$

- 2) *gęstość bezwzględna (statyczna)*

$$\rho_a = M_c/V_a, \quad (11.4)$$

- 3) *gęstość pozorna (kinetyczna)*

$$\rho_c = M_c/V_c. \quad (11.5)$$

Określając gęstość cząstki, należy baczyć, aby odnosiła się ona do jej stanu, miarodajnego dla rozważanego zjawiska. Przykładowo, cząstki trocin mają inną gęstość pozorną w stanie suchym i w stanie mokrym, bo wskutek nasiąkania wodą wzrastają ich masa oraz objętość.

11.2.2.7. Prędkość swobodnego opadania. Parametr ten określa prędkość ustalonego i jednostajnego przemieszczania się cząstki pod wpływem siły ciężkości w nieruchomej cieczy. Dokładnie zdefiniujemy go nieco dalej (podrozdz. 15.2), lecz należy tu o nim wspomnieć, gdyż jest bardzo dogodną praktycznie miarą zdolności dynamicznych cząstek zawiesiny.

11.2.2.8. Wymiary cząstek. Podstawowe wymiary cząstek regularnych definiuje geometria. Natomiast w przypadku cząstek nieregularnych mamy do wyboru albo posługiwanie się niezwykle kłopotliwym opisem ich indywidualnego kształtu i wymiarów, albo stosowanie jakiejś formy *opisu przybliżonego*. Można wyróżnić dwa typy przybliżonych wymiarów cząstek:

- 1) *wymiar zastępczy* (który może być *dynamiczny* lub *geometryczny*),
- 2) *wymiar projekcyjny*.

Pierwszą z tych kategorii definiujemy jako wymiar takiej nieporowatej cząstki o ustalonym jako równoważny kształcie geometrycznym, która wykazuje identyczną wartość wybranej cechy porównawczej, jak cząstka rzeczywista. Jeżeli jako tę cechę porównawczą wybierzemy którąś z wielkości związanych z ruchem cząstki (najczęściej przyjmujemy tu

jej prędkość swobodnego opadania), to otrzymamy wymiar zastępczy dynamiczny. Jeżeli zaś taka cecha porównawcza związana jest z rozmiarami cząstki (np. jej objętość, czy też powierzchnia zewnętrzna), to mamy wymiar zastępczy geometryczny. Najczęściej chyba używanym wymiarem tego typu jest średnica równoważna cząstki d_c , równa średnicy kuli o objętości równej objętości kinetycznej cząstki

$$d_c = \left(\frac{6V_c}{\pi} \right)^{1/3}. \quad (11.6)$$

Z kolei mianem wymiaru projekcyjnego określamy umowny wymiar cząstki, wyznaczany na bazie kształtu rzutu (czyli projekcji) cząstki na płaszczyznę. Istnieje szereg bardzo ciekawych i niekiedy wyszukanych technik rejestracji kształtu tego rzutu, często wykorzystujących płaską fotografię cząstki, lub jej cień. Najbardziej jednak powszechnym przykładem tego parametru jest wymiar sitowy, powszechnie stosowany w geologii, hydrogeologii, hydrauliczce wód podziemnych, hydrotechnice, geotechnice i w dyscyplinach pokrewnych [3]. Określa się go, przesiewając próbkę rozdrobnionego materiału (w naszym przypadku stanowić on będzie pewną porcję zawiesiny ziarnistej, uprzednio oddzielonej od płynu nośnego) przez zestaw sit, najczęściej o znormalizowanych średnicach otworów. W ten sposób dzielimy próbkę na frakcje, których procentowe udziały masowe charakteryzują skład danego materiału. Informacja ta może być wykorzystywana przy wyborze cząstek charakterystycznych. Metoda ta może być stosowana tylko dla takich cząstek, które po oddzieleniu od płynu zachowują swą odrębność (np. piasek, popiół, stłuczka szklana – ogólnie mówiąc, dla cząstek ziarnistych).

W niektórych przypadkach (głównie odnoszących się do warunków przemysłowych) można określać wymiary cząstek teoretycznie, opierając się na informacjach o warunkach ich powstawania (np. [89]).

12. RÓWNANIA RUCHU CZĄSTKI ZAWIESZONEJ W PŁYNIU

12.1. Drugie prawo Newtona

Podstawową relację, opisującą ruch cząstki w płynie, otrzymujemy z *II prawa Newtona* (czyli z *prawa zachowania pędu*). Mówi ono, że

Zmiana pędu ciała w czasie jest równa sumie sił, działających na to ciało.

Pamiętając, że siły mają dwojaki charakter (są *siły masowe* \mathbf{F}_M i *siły powierzchniowe* \mathbf{F}_P), możemy więc napisać

$$\frac{d(\mathbf{v}_c M_c)}{dt} = \sum_{i=1}^{I_m} \mathbf{F}_{Mi} + \sum_{j=1}^{J_m} \mathbf{F}_{Pj}. \quad (12.1)$$

W relacji tej przyjęto, że masa cząstki M_c może zmieniać się w czasie (np. wskutek rozpuszczania się, rozdrabniania, krystalizacji, czy flokulacji). Tego typu procesy w inżynierii sanitarnej uwzględniamy najczęściej przy opisie zjawisk, zachodzących podczas oczyszczania wody i ścieków. W zagadnieniach migracji zanieczyszczeń możemy z reguły przyjmować, że

$$M_c = V_m \rho_m = V_c \rho_c = \frac{1}{6} \pi d_c^3 \rho_c = \text{const}. \quad (12.2)$$

Uwzględniając ponadto, że prędkość cząstki \mathbf{v}_c jest określona przez jej *promień wodzący*

$$\mathbf{v}_c(t) = \frac{d\mathbf{r}_c(t)}{dt}, \quad (12.3)$$

możemy następująco przepisać (12.1):

$$M_c \frac{d^2 \mathbf{r}_c}{dt^2} = \sum_{i=1}^{I_m} \mathbf{F}_{Mi} + \sum_{j=1}^{J_m} \mathbf{F}_{Pj}. \quad (12.4)$$

12.2. Wyznaczanie sił, działających na cząstkę

12.2.1. Siły masowe

W warunkach naturalnych praktycznie jedyną siłą masową, działającą na cząstkę, jest *siła ciężkości*

$$\sum_{i=1}^{J_m} \mathbf{F}_{Mi} = \mathbf{G} = \rho_c V_c \mathbf{f} = \rho_c V_c \mathbf{g}. \quad (12.5)$$

W obiektach technicznych, służących do oczyszczania wody i ścieków, cząstka zawieszona może także podlegać *sile odśrodkowej* (np. w *cyklonach* do odpylania powietrza lub w *piaskownikach wirowych*) oraz/lub oddziaływaniom *elektromagnetycznym* (np. w *elektrofiltrach*). Jednak te zagadnienia wykraczają poza zakres naszych zainteresowań.

12.2.2. Siły powierzchniowe

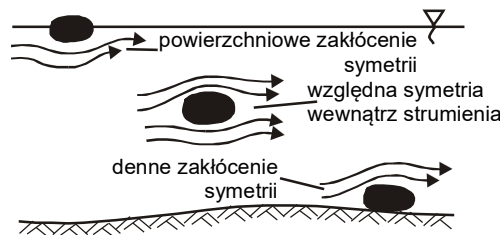
12.2.2.1. Uwagi ogólne. Jak wiemy z mechaniki płynów (np. [101]), *siłę* działającą na powierzchnię S , możemy obliczyć, jeśli znamy *naprężenie* \mathbf{p}_n na tej powierzchni, które z kolei określone jest przez *tensor naprężenia* $[P]$ oraz *wektor jednostkowy* \mathbf{n} , normalny do powierzchni S . Mamy więc

$$\sum_{j=1}^{J_m} \mathbf{F}_{Pj} = \int_S [P] \mathbf{n} dS. \quad (12.6)$$

Tensor naprężenia $[P]$ powiązany jest z polem prędkości płynu \mathbf{u} oraz z jego ciśnieniem p relacją, nazywaną *hipotezą Newtona* [4.122]. Tak więc dla wyznaczenia wypadkowej siły powierzchniowej w (12.4) musimy uprzednio określić pole prędkości i ciśnienia wokół cząstki zawieszony, w ogólnym przypadku z uwzględnieniem obecności cząstek sąsiednich.

Jest to zadanie bardzo złożone, nawet jeśli pominiemy ten ostatni element. Możliwe przypadki obrazuje szkic na rys. 12.1. Stosunkowo najprościej będzie wyznaczyć wartość siły powierzchniowej dla cząstek całkowicie zanurzonych w płynie. Dużym utrudnieniem będzie wpływ brzegu obszaru przy skrajnych położeniach cząstek (siły powierzchniowe i denne).

W dalszym ciągu tego rozdziału omówimy te rozwiązania równań ruchu cieczy, opływającej kulę (bardzo często przyjmowanej jako wyidealizowany kształt cząstki), które miały wpływ na sposób wyznaczenia wypadkowej siły powierzchniowej, a następnie przedstawimy zależności praktyczne.



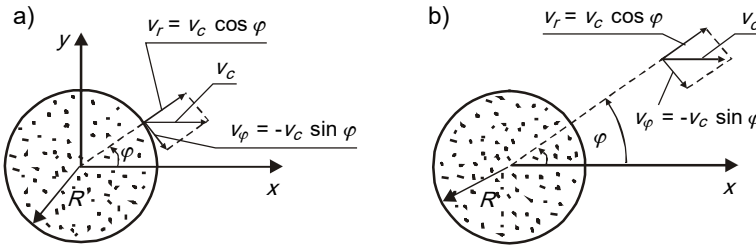
Rys. 12.1. Charakter opływu cząstek przy ich różnym usytuowaniu w strumieniu płynu

12.2.2.2. Ustalony ruch kuli w cieczy nielepkiej – paradoks d'Alemberta. Najprostszym przypadkiem ruchu ciała w płynie jest postępowy, prostoliniowy i ustalony ruch kuli, o promieniu R z prędkością v_c , w nieruchomej cieczy nielepkiej o stałej gęstości. Zgodnie z twierdzeniem Lagrange'a [101], w takiej sytuacji ruch otaczającego ciała płynu można uznać za bezwirowy. Istnieje więc *potencjał prędkości* Φ_p , który spełnia równanie Laplace'a

$$\Delta\Phi_p = 0. \quad (12.7)$$

Ze względu na kształt obszaru przyjmijmy sferyczny układ współrzędnych (rys. 12.2a). Równanie (12.7) przyjmie wtedy następującą postać:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Phi_p}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\sin \varphi \frac{\partial \Phi_p}{\partial \varphi} \right) = 0. \quad (12.8)$$



Rys. 12.2. Ruch kuli względem płynu (a – ruchoma kula w płynie nieruchomym, b – opływ nieruchomej kuli)

Powierzchnia kuli porusza się z prędkością v_c , o składowych

$$\mathbf{v}_c = v_{cr} \mathbf{e}_r + v_{c\varphi} \mathbf{e}_\varphi = v_c \cos \varphi \mathbf{e}_r - v_c \sin \varphi \mathbf{e}_\varphi. \quad (12.9)$$

Rozważamy tu ruch cieczy nielepkiej, więc na powierzchni kuli jako warunek brzegowy posłużą nam wymóg zgodności normalnych do powierzchni składowych prędkości kuli i cieczy

$$r = R, \quad u_{ir} = \frac{\partial \Phi_p}{\partial r} = v_{cr} = v_c \cos \varphi. \quad (12.10)$$

Z kolei w dużej odległości od kuli (gdy $r \rightarrow \infty$) płyn się nie porusza, a więc potencjał osiąga tam wartość stałą. Jest to stała dowolna, bowiem nie wpływa na wartość pola prędkości [101]. Najwygodniej więc przyjmąć

$$r \rightarrow \infty, \quad \Phi_p = 0. \quad (12.11)$$

Ze względu na postać podanych wyżej warunków brzegowych, możemy szukać rozwiązania zadania w postaci iloczynu

$$\Phi_p = K(r) \cos \varphi, \quad (12.12)$$

który po podstawieniu do równania (12.8) daje równanie różniczkowe zwyczajne z niewiadomą funkcją $K(r)$, postaci

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dK}{dr} \right) - 2K = 0. \quad (12.13)$$

Jest to równanie typu Eulera [11]. Podstawiając

$$K = r^k, \quad (12.14)$$

otrzymamy

$$k(k+1) - 2 = 0, \quad (12.15)$$

skąd

$$k_1 = 1, k_2 = -2. \quad (12.16)$$

Oznacza to, że ogólnym rozwiązaniem relacji (12.13) jest funkcja

$$K(r) = Ar + \frac{B}{r^2}. \quad (12.17)$$

Wykorzystując warunki brzegowe, otrzymujemy następujące rozwiązanie, opisujące potencjał prędkości płynu:

$$\Phi_p = -\frac{v_c R^3 \cos \varphi}{2r^2}. \quad (12.18)$$

Składowe wektora prędkości płynu *nielepkiego*, indukowanej przez ruch kuli, wynoszą więc

$$u_{ir} = \frac{\partial \Phi_p}{\partial r} = \frac{v_c R^3 \cos \varphi}{r^3}, \quad (12.19)$$

$$u_{i\varphi} = \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi_p}{\partial \varphi} = \frac{v_c R^3 \sin \varphi}{2r^3}. \quad (12.20)$$

Rozkład ciśnienia na powierzchni kuli wyznaczmy w tym przypadku z równania Bernoulliego, napisanego dla jednego punktu na powierzchni kuli oraz drugiego – w nieskończoności (gdzie $p = p_o$ oraz $\mathbf{u} = 0$). Ma ono postać

$$p = p_o - \frac{\rho u_i^2}{2}. \quad (12.21)$$

Po wykorzystaniu relacji

$$u_i^2 = u_{ir}^2 + u_{i\varphi}^2, \quad (12.22)$$

oraz po podstawieniu (12.19) i (12.20), otrzymujemy

$$p = p_o - \frac{\rho v_c^2 R^6}{8r^6} (4 \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi) \quad (12.23)$$

Możemy teraz obliczyć siłę powierzchniową, zgodnie z (12.5). W płynie nielepkim tensor naprężenia ma prostą postać

$$[\mathbf{P}] = -p [\mathbf{E}], \quad (12.24)$$

co po podstawieniu do (12.5) daje

$$\sum_{j=1}^{J_m} \mathbf{F}_{pj} = - \int_S p \mathbf{n} dS. \quad (12.25)$$

Całkując zgodnie z powyższym funkcje (12.23), otrzymamy

$$\sum_{j=1}^{J_m} \mathbf{F}_{Pj} = 0. \quad (12.26)$$

Fakt zerowania się siły, z jaką płyn nielepki działa na poruszające się w nim ciało, nosi nazwę *paradoksu d'Alemberta*.

12.2.2.3. Niestalony ruch kuli w cieczy nielepkiej – siła od masy stowarzyszonej. Równanie (12.7) zachowuje swą ważność także w ruchu niestalonym, gdy $\mathbf{v}_c = \mathbf{v}_c(t)$. Aby jednak określić w tym przypadku rozkład ciśnienia, musimy zamiast równania Bernoulliego zastosować całkę Cauchy'ego-Lagrange'a [101]

$$\rho \frac{\partial \Phi_p}{\partial t} + \frac{\rho u_i^2}{2} + p = C = \text{const}, \quad (12.27)$$

skąd

$$p = C - \rho \frac{\partial \Phi_p}{\partial t} - \frac{\rho u_i^2}{2}, \quad (12.28)$$

oraz

$$\sum_{j=1}^{J_m} \mathbf{F}_{Pj} = - \int_S C \mathbf{n} dS + \int_S \rho \frac{\partial \Phi_p}{\partial t} \mathbf{n} dS + \int_S \frac{\rho u_i^2}{2} \mathbf{n} dS. \quad (12.29)$$

Pierwsza całka po prawej stronie powyższej równości jest równa zero (bo wartość C jest z definicji stała), a jeśli wykorzystamy (12.19) i (12.20), to stwierdzimy, że znika również trzecia z tych całek. Mamy więc ostatecznie

$$\sum_{j=1}^{J_m} \mathbf{F}_{Pj} = \frac{d}{dt} \int_S \rho \Phi_p \mathbf{n} dS. \quad (12.30)$$

Podstawiając w ostatniej relacji (12.18), otrzymamy

$$\sum_{j=1}^{J_m} \mathbf{F}_{Pj} = - \frac{d}{dt} \int_S \frac{\rho v_c(t) R^3 \cos \varphi}{2r^2} \mathbf{n} dS = - \frac{2}{3} \pi R^3 \rho \frac{dv_c}{dt} \mathbf{i} = \mathbf{F}_{MS}. \quad (12.31)$$

Rezultat ten określa pewną siłę, działającą równolegle do wektora prędkości cząstki, której wartość bezwzględna jest równa *połowicie masy cieczy, wypartej przez ciało, pomnożonej przez jego przyspieszenie*. Podstawiając (12.31) do (12.1), widzimy, że podczas niestalonego ruchu kuli w cieczy nielepkiej mamy

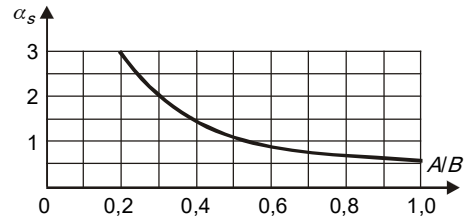
$$\left(M_C + \frac{1}{2} M_W \right) \frac{d\mathbf{v}_c}{dt} = \sum_{i=1}^{I_m} \mathbf{F}_{Mi}. \quad (12.32)$$

Oznacza to, że rozważany rodzaj ruchu można traktować jako równoważny ruchowi danego ciała w próżni, o ile jego masę zwiększymy o pewną wartość. Dla kuli jest ona równa połowie masy płynu wypartego. Tę dodatkową, fikcyjną masę nazywamy *masą stowarzyszoną* M_S . Pod względem bilansu energii równoważy ona rzeczywiste pole prędkości, indukowane przez ciało, a związane z nią oddziaływanie nazywamy *siłą od masy stowarzyszonej* [149].

Dla ciał o bardziej złożonych kształtach obliczenie masy stowarzyszonej jest trudne. W praktyce posługujemy się relacją roboczą, zgodnie z którą jest ona równa masie cieczy wypartej, pomnożonej przez *współczynnik masy stowarzyszonej* α_s . Mamy więc

$$M_S = \alpha_s M_W = \alpha_s \rho V_c. \quad (12.33)$$

Dla kuli zachodzi $\alpha_s = 0,5$. Wartości tego współczynnika dla elipsoidy obrotowej o półosiach A i B, poruszającej się wzdłuż krótszej osi, pokazano na rys. 12.3.



Rys. 12.3. Współczynnik masy stowarzyszonej

12.2.2.4. Ustalony ruch kuli w cieczy lepkiej – siła Stokesa. Przejdziemy teraz do wyznaczenia siły powierzchniowej, działającej między cząstką a płynem lepkiem. Ponownie rozważymy najprostszy przypadek ruchu, z tą różnicą, że teraz rozważymy opływ nieruchomej kuli o promieniu R, poziomym strumieniem nieściśliwego płynu, poruszającego się ze stałą prędkością v_c (rys. 12.2b).

Przybliżone rozwiązanie równań zachowania masy i pędu płynu dla takiego zadania można uzyskać po przyjęciu klasycznego założenia Stokesa, zgodnie z którym pomija się siły masowe oraz przyspieszenie cząstki. Pozwala to następująco zapisać równania ruchu cieczy [101]:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\frac{\partial^2 u_r}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_r}{\partial \varphi^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\operatorname{ctg} \varphi}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} - \frac{2u_r}{r^2} - \frac{2 \operatorname{ctg} \varphi}{r^2} u_\varphi \right] &= 0, \\ -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \varphi} + \mu \left[\frac{\partial^2 u_\varphi}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_\varphi}{\partial \varphi^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} + \frac{\operatorname{ctg} \varphi}{r^2} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} - \frac{u_\varphi}{r^2 \sin^2 \varphi} \right] &= 0, \quad (12.34) \\ \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{2u_r}{r} + \frac{u_\varphi \operatorname{ctg} \varphi}{r} &= 0. \end{aligned}$$

Warunki brzegowe będą tu następujące (rys. 12.2b):

$$\left. \begin{aligned} r = R: \quad u_r = v_{cr} = 0, \quad u_\varphi = v_{c\varphi} = 0; \\ r \rightarrow \infty \quad u_r = v_{cr} = v_c \cos \varphi, \quad u_\varphi = v_{c\varphi} = -v_c \sin \varphi, \\ p = p_o. \end{aligned} \right\} \quad (12.35)$$

Wobec ich postaci, celowe jest poszukiwanie rozwiązania w postaci następujących iloczynów:

$$\left. \begin{aligned} u_r(r, \varphi) &= f(r) \cos \varphi, \\ u_\varphi(r, \varphi) &= -g(r) \sin \varphi, \\ p(r, \varphi) &= p_o + \mu h(r) \cos \varphi. \end{aligned} \right\} \quad (12.36)$$

Podstawiając (12.36) do (12.34), otrzymamy układ trzech równań różniczkowych zwyczajnych

$$\left. \begin{aligned} -\frac{dh}{dr} + \frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{df}{dr} - \frac{4(f-g)}{r^2} &= 0, \\ -\frac{h}{r} + \frac{d^2 g}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dg}{dr} - \frac{2(f-g)}{r^2} &= 0, \\ -\frac{df}{dr} + \frac{2(f-g)}{r} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (12.37)$$

z warunkami brzegowymi

$$\left. \begin{aligned} r = R: \quad f = 0, \quad g = 0, \\ r \rightarrow \infty: \quad f = v_c, \quad g = v_c, \quad h = 0. \end{aligned} \right\} \quad (12.38)$$

Z trzeciego równania układu (12.37) mamy

$$g = \frac{r}{2} \frac{df}{dr} + f, \quad (12.39)$$

co pozwala wyliczyć z drugiego równania tego układu funkcję pomocniczą h

$$h = \frac{r^2}{2} \frac{d^3 f}{dr^3} + 3r \frac{d^2 f}{dr^2} + 2 \frac{df}{dr}. \quad (12.40)$$

Podstawiając dwie ostatnie relacje do pierwszego z równań (12.37), mamy

$$r^3 \frac{d^4 f}{dr^4} + 8r^2 \frac{d^3 f}{dr^3} + 8r \frac{d^2 f}{dr^2} - 8 \frac{df}{dr} = 0. \quad (12.41)$$

Jest to równanie typu Eulera [11], którego całka ogólna ma postać

$$f = \frac{A}{r^3} + \frac{B}{r} + C + Dr^2. \quad (12.42)$$

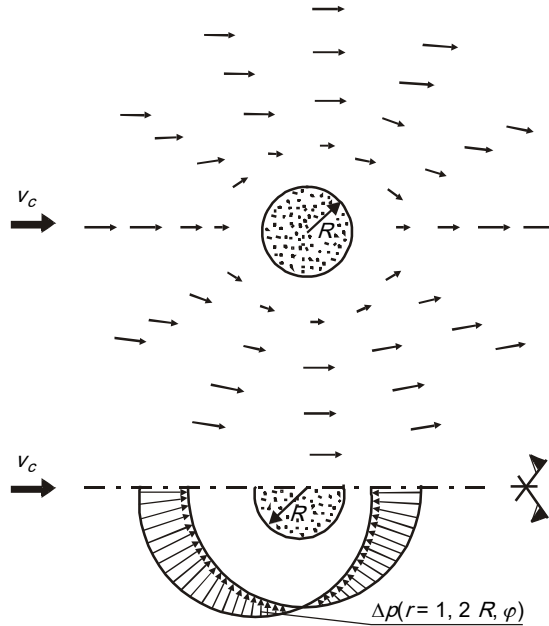
Wobec (12.39) i (12.40) mamy wtedy

$$g = -\frac{A}{2r^3} + \frac{B}{2r} + C + 2Dr^2, \quad h = \frac{B}{r^2} + 10Dr. \quad (12.43)$$

Po wyznaczeniu stałych całkowania z warunków brzegowych i uwzględnieniu (12.36), otrzymamy następujące zależności, opisujące pole prędkości i ciśnienia wokół kuli:

$$\left. \begin{aligned} u_r(r, \varphi) &= v_c \left[1 - \frac{3R}{2r} + \frac{R^3}{2r^3} \right] \cos \varphi, \\ u_\varphi(r, \varphi) &= -v_c \left[1 - \frac{3R}{4r} - \frac{R^3}{4r^3} \right] \sin \varphi, \\ p(r, \varphi) &= p_o - \frac{3}{2} \mu \frac{v_c R}{r^2} \cos \varphi. \end{aligned} \right\} \quad (12.44)$$

Pole prędkości i rozkład ciśnienia, opisany tymi relacjami, przedstawiono graficznie na rys. 12.4. Zauważmy, że w tym przypadku zachodzi pełna zgodność prędkości powierzchni kuli oraz elementów płynu, które do tej powierzchni przylegają. Jest to zgodne z fizycznym przebiegiem zjawiska. W zadaniu poprzednim (dla cieczy nielepkiej) występował poślizg między płynem a powierzchnią kuli, sprzeczny zarówno z teoretycznym, jak i obserwowanym, oddziaływaniem adhezji.



Rys. 12.4. Pole prędkości i ciśnienia wokół opływanej kuli

Po wyznaczeniu pól prędkości i ciśnienia, wyznaczmy tę ich część, która jest uwarunkowana tylko lepkością płynu. Odejmując więc (12.19), (12.20) i (12.21) od odpowiednich relacji (12.44), otrzymujemy

$$\left. \begin{aligned} u_r &= -\frac{3}{2}v_c \cos \varphi \left(\frac{R}{r} - \frac{R^3}{r^3} \right), \\ u_\varphi &= \frac{3}{4}v_c \sin \varphi \left(\frac{R}{r} + \frac{R^3}{r^3} \right), \\ p_l &= -\frac{\rho v_c^2 R^6}{8r^6} (4 - 9 \sin^2 \varphi) - \frac{3}{2} \mu \frac{v_c R}{r^2} \cos \varphi. \end{aligned} \right\} \quad (12.45)$$

Siła, z jaką wywołana lepkością część strumienia działa na kulę, zgodnie z relacją (12.5), wynosi

$$\begin{aligned}
 W_S &= \int_S (p_{rr} \cos \varphi - p_{r\varphi} \sin \varphi) dS = \\
 &= \int_S \left[\left(2\mu \frac{\partial u_{lr}}{\partial r} - p_l \right) \cos \varphi - \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_{lr}}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_{l\varphi}}{\partial r} - \frac{u_{l\varphi}}{r} \right) \sin \varphi \right] dS = \quad (12.46) \\
 &= 2\pi\mu v_c R + 4\pi\mu v_c R = 6\pi\mu v_c R.
 \end{aligned}$$

Pierwszy człon funkcji podcałkowej w tym wyrażeniu określa wpływ naprężeń normalnych, zaś drugi – stycznych. Jak widać z powyższego, 1/3 siły, z jaką płyn działa na cząstkę, pochodzi od naprężeń normalnych, zaś 2/3 – od naprężeń stycznych.

Kierunek i zwrot siły W_S , nazywanej niekiedy *siłą Stokesa*, są zgodne z kierunkiem i zwrotem wektora prędkości cieczy (zaś przeciwne do zwrotu wektora prędkości kuli). Tak więc jeśli nieruchomą kulę opływa strumień płynu, to W_S jest *siłą naporu*. W przeciwnym razie jest to *siła oporu* ośrodka płynnego.

Otrzymany wzór (12.46) wykazuje bardzo dobrą zgodność z wynikami pomiarów, lecz tylko w bardzo ograniczonym zakresie, gdy liczba Reynoldsa

$$Re = \frac{v_c R}{\nu} \leq 0,5. \quad (12.47)$$

Przykładowo, jeśli rozważać będziemy krople wody swobodnie opadające w powietrzu, to warunek powyższy ogranicza ważność (12.46) do kropelek o średnicy nie większej niż 0,074 mm, a więc może co najwyżej opisywać opadanie mgły. Drugim ograniczeniem jest kształt cząstki (kulisty), zaś trzecim – warunki ruchu (ustalony, po linii prostej).

Tak więc zakres stosowalności rozwiązania Stokesa jest bardzo wąski. Ma ono jednak duże walory poznawcze.

12.2.2.5. Niestalony ruch kuli w cieczy lepkiej – siła Basseta. Omówione w poprzednim punkcie zadanie można rozwiązać analitycznie dla pewnego szczególnego przypadku ruchu niestalonego. Jest to mianowicie taki przypadek, gdy w już przyjętych warunkach prędkość cząstki zostaje w nagły sposób (impulsowo) zwiększona od 0 do wartości v_c . Pominiemy tu rozbudowany ciąg odpowiednich obliczeń [149] i ograniczymy się do podania rezultatu końcowego, opisującego czasową zmienność siły oporu ośrodka. Ma on następującą postać:

$$W_{st}(t) = 6\pi\mu R v_c \left(1 + R \sqrt{\frac{1}{\pi \nu t}} \right). \quad (12.48)$$

Główny walor tego wzoru polega na tym, że umożliwia on uzyskanie rozwiązania analitycznego dla ogólniejszego przypadku niestalonego ruchu kuli w cieczy lepkiej.

Rozwiązanie to można otrzymać stosując metodę *całki Duhamela*. Jest to pewna postać *całki spłotu* [93], która pozwala wyznaczyć przebieg procesu niestalonego, wywołanego dowolnym przebiegiem funkcji wymuszającej f_w , jeżeli znamy opis tego procesu $p(t)$ Δf dla wymuszenia o charakterze impulsu Δf . Możemy wtedy potraktować ciągły przebieg funkcji f_w jako sumę lokalnych zmian „schodkowych”, o wartości $\Delta f(t)$ każda, a ostateczną wartość szukanej funkcji P dla czasu t wyrazić całką

$$P(t) = \Delta f(t=0) p(t) + \int_0^t \frac{df}{dt} p(t-\tau) d\tau \quad (12.49)$$

W rozważanym tu przypadku rolę wymuszenia f pełni prędkość cząstki v_c , szukana funkcja P oznacza siłę oporu $W_S(t)$, zaś reakcję układu na gwałtowną zmianę wymuszenia opisuje relacja (12.48). Podstawiając więc poszczególne wyrażenia do (12.49), zgodnie z powyższym opisem, mamy

$$\begin{aligned} W_S(t) &= 6\pi\mu R\Delta v_c(t=0) \left[1 + R\sqrt{\frac{1}{\pi vt}} \right] + \\ &+ \int_0^t 6\pi\mu R \frac{dv_c}{dt} \left[1 + R\sqrt{\frac{1}{\pi v(t-\tau)}} \right] d\tau = \\ &= 6\pi\mu R v_c(t) + 6\sqrt{\pi v \rho} R^2 \left[\frac{\Delta v_c(o)}{\sqrt{t}} + \int_0^t \frac{dv_c(t)}{dt} \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}} \right]. \end{aligned} \quad (12.50)$$

Pierwszy człon po prawej stronie tego wyrażenia odpowiada znanej nam już sile Stokesa, drugi – uwzględnia ewentualną początkową zmianę prędkości cząstki (najczęściej zmiany takiej nie będzie), zaś trzeci człon uwzględnia zmienność procesu w czasie. Opisywana tym członem wielkość fizyczna nazywana jest *siłą Basseta*. Jej wyznaczenie jest trudne, gdyż określa ją wyrażenie różniczkowo-całkowe. Oznacza to, że wartość tej siły jest uzależniona nie tylko od stanu układu w danym momencie, ale też od jego stanów przeszłych.

Na szczęście wartość siły Basseta odgrywa istotniejszą rolę w bilansie sił, działających na cząstkę, dopiero przy znacznych przyspieszeniach, gdy okres zmian warunków ruchu jest wyrażany w sekundach [153, 154]. Tymczasem w interesujących nas tu zagadnieniach migracji zanieczyszczeń zmiany te z reguły zachodzą dużo wolniej. Dzięki temu najczęściej możemy tę siłę pominać.

12.2.2.6. Uogólnienia wzoru Stokesa. Zakres ważności relacji (12.46) jest bardzo ograniczony (patrz (12.47)). Wynika to w głównej mierze z odrzucenia członu bezwładnościowego w równaniach (12.33). Z tego względu od dawna podejmowano próby generalizacji tego rozwiązania. Szczególnie interesująca poznawczo była propozycja Oseena [149], zgodnie z którą nie odrzuca się całkowicie członu adwekcyjnego, lecz linearyzuje się go, zgodnie z relacją

$$(\mathbf{u} \text{ grad}) \mathbf{u} \approx (v_c \text{ grad}) \mathbf{u}. \quad (12.51)$$

Daje to, zamiast (12.46), następujący wzór:

$$W_{SO} = 6\pi\mu v_c R \left(1 + \frac{3}{16} \text{Re} \right). \quad (12.52)$$

Jednakże wprowadzenie (12.51) daje znikomą poprawę sytuacji, bo (12.52) jest ważne tylko do $\text{Re} < 2$. Dalsze próby zwiększenia zakresu stosowalności wzoru opisującego siłę Stokesa także nie przyniosły rezultatów, które w zasadniczym stopniu poprawiałyby sytuację. Z tego względu nie będziemy ich tu omawiali.

Zajmiemy się natomiast pokrótce innymi czynnikami, wpływającymi na wartość siły oporu.

I tak, dla uwzględnienia przestrzennej zmienności pola prędkości przyjmujemy, że wektor siły oporu zależy od różnicy wektorów prędkości cząstki i płynu, czyli w relacji (12.46) moduł tej siły zastępujemy wektorem \mathbf{W}_S , zaś moduł prędkości cząstki v_c – przez różnicę wektorów $(\mathbf{v}_c - \mathbf{u})$.

Zmiana prędkości płynu w otoczeniu cząstki powoduje pojawienie się *siły Saffmana* S_F . Działa ona w kierunku gradientu prędkości (a więc poprzecznie do kierunku ruchu), lecz ma do niego przeciwny zwrot.

Drugim czynnikiem, także zorientowanym prostopadle do wektora prędkości, jest *siła nośna*. Pojawia się ona wtedy, gdy cząstka wykonuje ruch obrotowy (*efekt Magnusa*). W rozważanych tu przypadkach ruch taki mógłby być wykonywany w zasadzie tylko wskutek zróżnicowania pola prędkości wokół cząstki. Nie będziemy uwzględniali tego czynnika, choć w niektórych sytuacjach (np. w transporcie hydraulicznym) może on odgrywać wyraźną rolę [149].

Musimy natomiast wprowadzić do równań efekt zróżnicowania ciśnienia zewnętrznego p_o , które dotychczas traktowaliśmy jako stałe (12.44), biorąc pod uwagę tylko tę część zmiany ciśnienia, która była wywołana ruchem płynu względem cząstki. Zmiana ciśnienia zewnętrznego wywiera na cząstkę siłę, równą

$$\mathbf{W}_P = -V \text{grad } p_o. \quad (12.53)$$

Najczęściej jest ona wywołana *hydrostatyczną* zmianą tego pola ciśnienia, a wtedy omawianą tu czynnik staje się znana *siłą Archimedesesa* [101]

$$\mathbf{W}_P = -\rho V \mathbf{g}. \quad (12.54)$$

12.2.2.7. Siła Newtona. Uwzględnienie omówionych wyżej zjawisk i wielkości fizycznych w istotnym stopniu poprawia dokładność opisu ruchu cząstek zawiesiny, lecz w dalszym ciągu dotyczy to bardzo niskich wartości liczby Reynoldsa, czyli odnosi się do warunków *ruchu laminarnego*.

Ze względu na brak analitycznych możliwości opisu wpływu *turbulencji* na przebieg dynamiki płynów [33], wykorzystujemy w takich sytuacjach możliwość empirycznego wsparcia rozważań teoretycznych. Aby najpierw określić strukturę matematycznej relacji, opisującej poszukiwaną siłę oporu ośrodka, posłużymy się klasyczną *metodą analizy wymiarowej* [178].

Rozważmy prostoliniowy ruch kuli o średnicy $d_c = 2R$ z prędkością v_c w płynie o gęstości ρ i kinematycznym współczynniku lepkości ν . Na kulę działa siła oporu W_N , powiązana z pozostałymi wielkościami nieznaną nam jeszcze relacją funkcyjną

$$f(W_N, v_c, \rho, \nu, d_c) = 0. \quad (12.55)$$

Baza wymiarowa tego zestawu wielkości fizycznych składa się z jednostek *masy* [M], *drogi* [L] i *czasu* [T], toteż *macierz wymiarową* możemy napisać w postaci

	W_N	v_c	ρ	ν	R	
[M]	1	0	1	1	0	(12.56)
[L]	1	1	-3	-1	1	
[T]	-2	-1	0	-1	0	

Rząd tej macierzy jest równy 3, toteż zgodnie z teorią analizy wymiarowej z pięciu wyżej zestawionych wymiarowych wielkości fizycznych możemy zbudować dwa niezależne ilorazy bezwymiarowe Π . W pełni równoważą one powyższe wielkości wymiarowe.

Roboczy układ równań, określający te ilorazy bezwymiarowe, ma tu postać [178]

$$\left. \begin{aligned} k_1 + k_3 + k_4 &= 0 \\ k_1 + k_2 - 3k_3 - k_4 + k_5 &= 0 \\ -2k_1 - k_2 - k_4 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (12.57)$$

Ma on dwa następujące liniowo niezależne rozwiązania:

$$\left. \begin{aligned} k_1 = 1, k_2 = 2, k_3 = -1, k_4 = 0, k_5 = -2, \\ k_1 = 0, k_2 = 1, k_3 = 0, k_4 = -1, k_5 = 1, \end{aligned} \right\} \quad (12.58)$$

które definiują dwa ilorazy bezwymiarowe

$$\Pi_1 = W_N v_c^{-2} \rho^{-1} R^{-2}, \quad \Pi_2 = v_c v^{-1} R. \quad (12.59)$$

Oznacza to, że funkcję (12.55) możemy zastąpić równoważną zależnością

$$g\left(\frac{W_N}{\rho v_c^2 R^2}, \frac{v_c R}{v}\right) = 0. \quad (12.60)$$

którą wygodnie jest przepisać jako relację

$$W_N = h(\text{Re}) \pi R^2 \frac{\rho v_c^2}{2}. \quad (12.61)$$

Mówi ona, że interesująca nas siła oporu da się wyrazić jako iloczyn pewnej, nieokreślonej jeszcze, funkcji liczby Reynoldsa

$$\text{Re} = \frac{2Rv_c}{v} \quad (12.62)$$

przez *powierzchnię czynną* cząstki (pkt 11.2.2.3) oraz przez *ciśnienie dynamiczne*. Te dwa ostatnie mnożniki określają *napór dynamiczny*, toteż funkcję $h(\text{Re})$ możemy zinterpretować jako ułamek, określający, jaką część teoretycznej siły naporu stanowi rzeczywista siła oporu ośrodka. Nazwiemy ten czynnik *współczynnikiem oporu* C_D .

Otrzymaliśmy więc następującą relację, opisującą szukaną siłę oporu ośrodka, nazywaną *siłą Newtona*:

$$W_N = C_D F_C \frac{\rho v_c^2}{2}. \quad (12.63)$$

Powyższych rozważań nie ograniczaliśmy do warunków ruchu turbulentnego, toteż dla ruchu laminarnego mamy oczywiście $W_N = W_S$ według (12.46). Dla małych liczb Reynoldsa musi więc zachodzić

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}}. \quad (12.64)$$

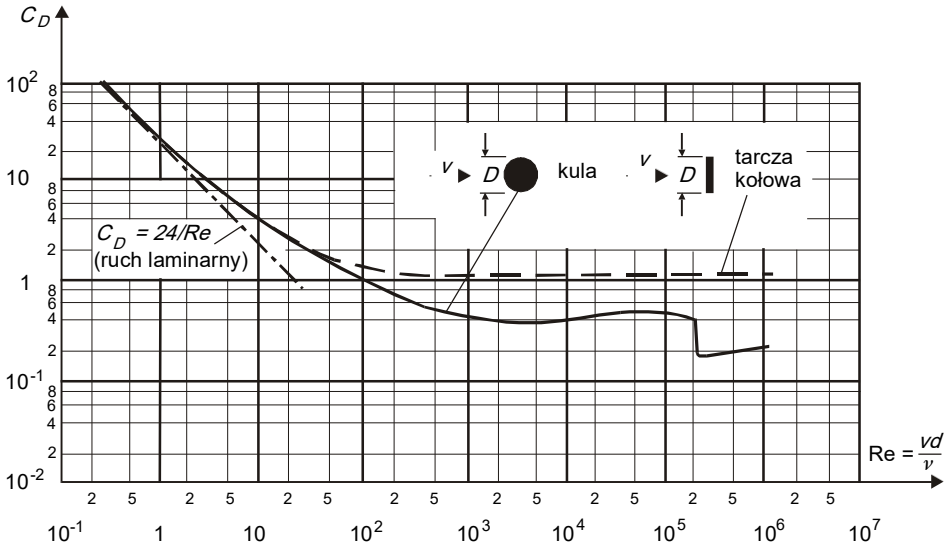
W warunkach laminarnych mamy więc możliwość teoretycznego wyznaczenia C_D . Dla ruchu turbulentnego współczynnik ten jest jednak określany empirycznie.

Wprowadzenie do równań takiego współczynnika usuwa równocześnie istotną trudność, związaną z koniecznością uwzględnienia kształtu cząstek, z reguły przecieży nieregularnych. Wyznaczamy mianowicie jego wartości doświadczalnie dla różnych, interesujących nas ciał w warunkach laboratoryjnych, a następnie wykorzystujemy je do obliczeń. Współczynniki oporu dla ciał o kształtach powtarzających się w praktyce umieszczane są w tabelach (patrz np. tabl. 16) lub na wykresach (np. rys. 12.5).

Istotnym czynnikiem, wpływającym na wartość C_D jest znane z hydromechaniki zjawisko *oderwania warstwy przyściennej*. Możemy tu wyróżnić dwa typy geometrycznych

kształtów ciał – dla których możliwe jest tylko jedno położenie punktu oderwania tej warstwy (w szczególności są to ciała, mające wyraźne krawędzie), oraz ciała, dla których położenie punktu oderwania zmienia się z warunkami przepływu (są to ciała opływowe). Dla pierwszej z tych kategorii współczynnik C_D jest dla danego ciała stały, podczas gdy dla drugiej – zależy od liczby Reynoldsa. Dla kuli (przy $800 < Re < 200\,000$) warto zapamiętać, że

$$C_D = 0,44. \quad (12.65)$$



Rys. 12.5. Współczynnik oporu kuli i tarczy kołowej [169]

Ten empiryczny charakter współczynnika oporu stwarza pewną trudność przy wykorzystywaniu wzoru Newtona (12.63), bowiem określające go nomogramy lub tabele mają postać numeryczną. Do obliczeń technicznych wygodnie jest dysponować informacjami, mającymi postać wzorów algebraicznych. Dla laminarnego opływu walca można korzystać ze wzoru [135]

$$C_D = \frac{9,43}{Re}. \quad (12.66)$$

W ruchu turbulentnym mamy na przykład relację [137]

$$C_D = 0,92 + \frac{27,22}{Re} + \frac{3077,8}{Re^2}. \quad (12.67)$$

12.3. Podstawowa wersja równania ruchu cząstki

Podsumowując dotychczasowe rozważania, możemy sformułować ostateczną postać podstawowego równania, wyrażającego II prawo Newtona dla cząstki zawiesziny.

Będziemy tu więc traktować ową cząstkę jako ciało o objętości V_c , przekroju czynnym F_C i gęstości ρ_c , którego kształt określany jest przez dobór empirycznego współczynnika

oporu C_D . Ciało to porusza się ruchem postępowym z prędkością \mathbf{v}_c w płynie o gęstości ρ i lepkości μ , przemieszczającym się z prędkością \mathbf{u} . Siła bezwładności cząstki równoważona jest przez jego ciężar, siłę wyporu (siłę Archimedesesa), siłę od masy stowarzyszonej oraz siłę oporu ośrodka. Pozostałe siły pomijamy, gdyż nie odgrywają one w tym bilansie istotnych ról.

Dla zapewnienia zgodności kierunku i zwrotu siły oporu z kierunkiem i zwrotem wektora prędkości płynu względem prędkości ciała, drugą potęgę prędkości we wzorze Newtona (12.63) zastępujemy iloczynem modułu różnicy tych wektorów przez ich różnicę wektorową. Stwierdzenia powyższe pozwalają napisać następującą postać *równania ruchu cząstki, poruszającej się w płynie rzeczywistym*:

$$\begin{aligned} \rho_c V_c \frac{d\mathbf{v}_c}{dt} = & (\rho_c - \rho) V_c \mathbf{g} + \\ & + \alpha_s \rho V_c \frac{d(\mathbf{u} - \mathbf{u}_c)}{dt} + D_D F_C \frac{\rho/|\mathbf{u} - \mathbf{v}_c|(\mathbf{u} - \mathbf{v}_c)}{2}. \end{aligned} \quad (12.68)$$

13. FORMUŁOWANIE ZAGADNIEŃ

13.1. Uwagi ogólne

Ruch każdej z cząstek charakterystycznych dla rozważanej zawiesziny możemy opisać równaniem różniczkowym (12.68), w którym niewiadomą jest prędkość cząstki \mathbf{v}_c . Po jej wyznaczeniu możemy określić trajektorie tych cząstek $\mathbf{r}_c(t)$, rozwiązując równanie (12.3). W takim ujęciu tor cząstki opisany jest przez układ dwóch równań różniczkowych, zwyczajnych, pierwszego rzędu.

Jednakże w pewnych sytuacjach (szczególnie wtedy, gdy własności układu zmieniają się w przestrzeni) dogodnie jest podstawić (12.3) do (12.68), otrzymując jedno równanie drugiego rzędu, w którym niewiadomą jest funkcja $\mathbf{r}_c(t)$.

Powyższe rozróżnienie dwóch formalnych wersji równania ruchu cząstki jest o tyle istotne, że ma związek z *warunkami granicznymi* – początkowymi i brzegowymi. W przypadku równań różniczkowych zwyczajnych terminy powyższe mają nieco inny sens, niż dla równań cząstkowych.

13.2. Warunki początkowe

Warunkami początkowymi dla równań różniczkowych zwyczajnych nazywamy takie informacje o szukanych funkcjach, które odnoszą się do jednej wartości zmiennej niezależnej (w tym przypadku do czasu t). Z reguły jest to rzeczywiście wartość początkowa $t = t_0$ (lub nawet $t = 0$).

Dla każdego równania I rzędu musimy zadać po jednym takim warunkiem. W interesujących nas tu zagadnieniach dla równania (12.68) mamy

$$\mathbf{v}_c(t_0) = \mathbf{v}_{co}, \quad (13.1)$$

zaś dla (12.3) piszemy

$$\mathbf{r}_c(t_0) = \mathbf{r}_{co}. \quad (13.2)$$

W przypadku równania II rzędu musimy podać dwie informacje początkowe. Jeżeli będziemy wykorzystywali relację (12.4), to wobec (12.3) jako warunki początkowe również posłużą nam dwie ostatnie zależności.

Tak postawiony problem nosi nazwę *zagadnienia Cauchy'ego* (lub *zagadnienia początkowego*) [53, 67].

13.3. Warunki brzegowe

Formułujemy je dla równań zwyczajnych przynajmniej II rzędu. Zawierają one informacje:

- 1) o wartościach szukanych funkcji (*warunki Dirichleta* lub *warunki I rodzaju*);
- 2) o wartościach ich pochodnych (*warunki Neumanna* lub *warunki II rodzaju*);
- 3) o związkach między wartościami a pochodnymi tych funkcji (*warunki Hankela* lub *warunki III rodzaju*),

na obu brzegach rozważanego obszaru $x_0 \leq x \leq x_k$. W ogólnym przypadku (lecz dla relacji liniowych) warunki te mają następującą postać (dla dowolnej niewiadomej funkcji f , która symbolizuje tu każdą ze składowych wektora prędkości i wektora wodzącego):

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 f(x_0) + \alpha_2 f'(x_0) + \alpha_3 f(x_k) + \alpha_4 f'(x_k) &= p, \\ \beta_1 f(x_0) + \beta_2 f'(x_0) + \beta_3 f(x_k) + \beta_4 f'(x_k) &= q. \end{aligned} \right\} \quad (13.3)$$

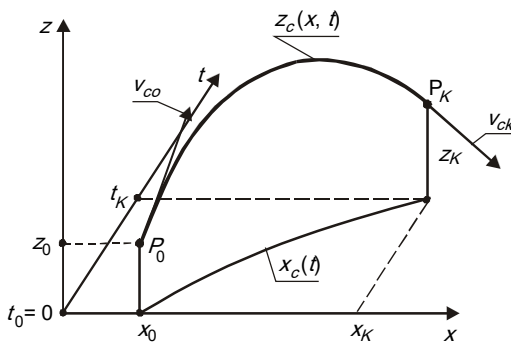
Zerując zbędne mnożniki α i β , otrzymujemy wyżej omówione szczególne przypadki warunków brzegowych.

Jeżeli w każdym z punktów brzegu stawiamy inny typ warunku, wtedy mówimy o *zagadnieniu mieszanym*.

13.4. Interpretacja geometryczna warunków granicznych

Rozważając ruch cząstki w płaszczyźnie xOz , z uwzględnieniem upływu czasu, można trajektorię jej ruchu przedstawić aksonometrycznie, jak na rys. 13.1.

Jeżeli ruch tej cząstki opisujemy przy pomocy dwóch równań I rzędu (12.3) i (12.68), to mamy do rozwiązania dwa (jednoczesne) *zagadnienia początkowe*. Jeden z warunków początkowych określa położenie cząstki (x_0, z_0) , zaś drugi – jej początkową prędkość v_{co} .



Rys. 13.1. Ruch ciała w płaszczyźnie xOz

Zadanie takie jest pod względem liczby i rodzaju warunków granicznych tożsame z opisem trajektorii cząstki jednym równaniem II rzędu (12.4), w którym ogólne symbole sił należy zastąpić już omówionymi relacjami.

Podkreślmy, że warunki graniczne zawsze należy formułować w odniesieniu do konkretnych sytuacji, mając na względzie możliwość ich realizacji. Tak więc powyższe zagad-

nienie początkowe odpowiada takiemu przypadkowi, gdy znamy punkt emisji zanieczyszczeń (mających postać zawiesiny) do odbiornika, jak również znamy prędkość emitowanych cząstek. W wyniku rozwiązania zadania określimy dalsze losy poszczególnych cząstek charakterystycznych. Tego typu zagadnienia można zaliczyć do kategorii problemów, sprządzających się do kontroli, opisu lub oceny sposobu funkcjonowania istniejącego obiektu lub systemu.

Zagadnienia brzegowe dotyczą już tylko równań typu (12.4). Za podstawowe należy tu uznać zagadnienie Dirichleta, gdy znamy początkowe i końcowe położenia każdej z cząstek charakterystycznych. W wyniku obliczeń otrzymamy między innymi prędkości początkowe tych cząstek. Możemy więc w ten sposób zasygnalizować istnienie drugiej z zasadniczych kategorii problemów technicznych – projektowanie nowych obiektów w taki sposób, aby spełnione były z góry zadane warunki i efekty ich funkcjonowania (tu: aby kształt obiektu zapewniał przemieszczenie cząstki od znanego punktu początkowego do wymaganego położenia końcowego).

Pozostałych możliwych kombinacji warunków brzegowych (13.3) nie będziemy tu szczegółowo omawiali, gdyż mogą one być realizowane i interpretowane w bardzo różnych wersjach. Przykładowo, można rozważać zadanie polegające na doborze położenia punktu początkowego (punktu emisji zanieczyszczeń) tak, aby przy znanej prędkości początkowej cząstka dotarła do zadanego punktu końcowego. Żartobliwie można powiedzieć, że może tu chodzić o takie ustawienie treningowej wyrzutni piłek tenisowych (o znanym sposobie działania), aby docierały one do stojącego nieruchomo na korcie gracza. Bardziej zaś serio można tu mówić o poszukiwaniu takiej lokalizacji kominu o znanej konstrukcji, aby opad emitowanych pyłów kominowych następował w wyznaczonym rejonie.

Z pewnością liczba możliwych rozwiązań technicznych, bazujących na różnych typach warunków brzegowych, nie została jeszcze wyczerpana.

14. ROZWIĄZYWANIE ZAGADNIENÍ

14.1. Twierdzenia o istnieniu rozwiązań

W przypadku zagadnienia Cauchy'ego (początkowego) kwestię istnienia rozwiązania rozstrzyga *twierdzenie Picarda* [53]. Mówi ono, że jeżeli funkcja f , wiążąca w rozważanym równaniu niewiadome i ich pochodne do rzędu $(n - 1)$ jest ciągła w otoczeniu pewnego punktu oraz spełnia w tym otoczeniu *warunek Lipschitza*, to równanie to ma w tym otoczeniu jednoznaczne rozwiązanie.

Przywołany tu warunek Lipschitza stanowi w istocie rzeczy wymóg ograniczenia wartości wspomnianej funkcji f [11].

Nieco mniej ogólne od poprzedniego jest *twierdzenie Cauchy'ego*, zgodnie z którym jeżeli funkcja f jest analityczna w otoczeniu pewnego punktu, to ma w otoczeniu tego punktu rozwiązanie jednoznaczne i analityczne.

Ważną praktyczną konkluzją z tego twierdzenia jest możliwość poszukiwania rozwiązań rozważanych tu równań w postaci funkcji analitycznych (w szczególności – w postaci szeregów potęgowych).

W przeciwieństwie do wyżej omówionych przypadków, istnienie rozwiązania zagadnień brzegowych nie jest w ogólnym przypadku rozstrzygnięte. Na szczęście w praktyce najczęściej napotykamy równania na tyle proste, że ich rozwiązywanie nie stanowi dużego problemu.

14.2. Rozwiązania analityczne

Teoria równań różniczkowych zwyczajnych jest na tyle rozwinięta, że nawet w konkretnych sytuacjach technicznych możemy uzyskać i wykorzystać analityczne rozwiązania równań ruchu cząstek zawiesiny. Istotnym warunkiem ich uzyskania jest prosty opis pola prędkości płynu nośnego.

W dalszym ciągu szczegółowo przedstawimy proces analitycznego rozwiązywania jednej z wersji równań (12.3) i (12.68). Posłuży nam to z jednej strony jako ogólny przykład metody postępowania, a z drugiej – dostarczy bardzo ważnych wniosków, które wykorzystamy do opracowania praktycznego modelu procesu przenoszenia zawiesiny.

Wyznamy więc trajektorię cząstki, wprowadzonej w chwili $t = 0$, z prędkością $\mathbf{v}_{co} = [v_{cox}, v_{coy}]$, do strumienia płynu, poruszającego się ze stałą prędkością $\mathbf{u} = [u_x, u_z]$.

Istotnym czynnikiem, który należy tu wziąć pod uwagę, jest wzajemna relacja między początkowymi prędkościami cząstki i płynu nośnego. Określa ona bowiem znak siły Newtona. Dopiero po jego określeniu możemy w ogólnej relacji (12.68) opuścić znak wartości bezwzględnej, co jest jednym z warunków rozwiązania tego równania. Dla każdego z kierunków ruchu mamy po dwie możliwości, które należy rozważyć oddzielnie.

Równanie wyjściowe (12.68) możemy, po wykonaniu prostych przekształceń, zapisać następująco:

$$\frac{d\mathbf{v}_c}{dt} = \mathbf{A} + \mathbf{B}|\mathbf{u} - \mathbf{v}_c|(\mathbf{u} - \mathbf{v}_c), \quad (14.1)$$

gdzie pomocnicze mnożniki zdefiniowane są relacjami

$$\mathbf{A} = \frac{(\rho_c - \rho)\mathbf{g}}{(\rho_c + \alpha_s\rho)} \quad (14.2)$$

$$\mathbf{B} = \frac{\rho C_D F_c}{2V_c(\rho_c + \alpha_s\rho)}. \quad (14.3)$$

Dla poziomego kierunku ruchu cząstki wzdłuż osi $0x$ mamy:

— opóźnianie cząstki przez płyn, gdy $v_{cox} > u_x$, zgodnie z równaniem

$$\frac{dv_{cx}}{dt} = -B(u_x - v_{cx})^2, \quad (14.4)$$

— przyspieszanie cząstki przez płyn, gdy $v_{cox} < u_x$, opisaną relacją

$$\frac{dv_{cx}}{dt} = B(u_x - v_{cx})^2. \quad (14.5)$$

Z kolei dla pionowej składowej prędkości cząstki (wzdłuż osi $0z$) możemy rozważać:

— początkowe opóźnianie cząstki ($v_{coz} > u_z$), gdy

$$\frac{dv_{cz}}{dt} = -A - B(u_z - v_{cz})^2, \quad (14.6)$$

— początkowe przyspieszanie cząstki ($v_{coz} < u_z$), gdy

$$\frac{dv_{cz}}{dt} = -A + B(u_z - v_{cz})^2. \quad (14.7)$$

Zestawione wyżej równania możemy rozwiązać analitycznie, korzystając z typowych metod teorii równań różniczkowych zwyczajnych [11, 53]. Kolejne stałe całkowania wyznaczymy z warunków początkowych

$$t = 0: \quad v_{cx} = v_{cox}, \quad v_{cz} = v_{coz}. \quad (14.8)$$

W rezultacie otrzymamy następujące funkcje, opisujące składowe prędkości cząstki w poszczególnych kierunkach i dla poszczególnych wariantów sytuacji początkowej:

— opóźnianie w kierunku poziomym (14.4)

$$v_{cx}(t) = u_x + \frac{v_{cox} - u_x}{1 + B(v_{cox} - u_x)t}, \quad (14.9)$$

— przyspieszanie w kierunku poziomym (14.5)

$$v_{cx}(t) = u_x + \frac{v_{cox} - u_x}{1 - B(v_{cox} - u_x)t}, \quad (14.10)$$

— opóźnianie w kierunku pionowym (14.6)

$$v_{cz}(t) = u_z + \sqrt{\frac{A}{B}} \operatorname{tg}(\operatorname{arctg} P - \sqrt{AB}t), \quad (14.11)$$

gdzie

$$P = \frac{v_{coz} - u_z}{\sqrt{A/B}}, \quad (14.12)$$

— przyspieszanie w kierunku pionowym (14.7)

$$v_{cz}(t) = u_z - \sqrt{\frac{A}{B}} \operatorname{tgh}(\operatorname{arthg} P + \sqrt{AB}t). \quad (14.13)$$

Drugi etap rozwiązywania problemu, wyznaczanie trajektorii cząstek z równania (12.3), należy również wykonać wariantowo. Z tego względu przeanalizujemy przebiegi otrzymanych wyżej funkcji ze wzrostem argumentu t do nieskończoności.

W przypadku rozwiązań (14.90) i (14.10) otrzymamy jednakowe rezultaty

$$v_{cx}(t \rightarrow \infty) = v_{ckx} = u_x, \quad (14.14)$$

niezależnie od relacji między prędkościami początkowymi (rys. 14.1a). Wynik ten dotyczy kierunku osi $0x$, lecz łatwo sprawdzić, że będzie on identyczny dla każdego innego kierunku poziomego (głównie chodzi tu o $0y$).

W kierunku pionowym sytuacja jest nieco bardziej skomplikowana. Gdy $v_{coz} > u_z$, prędkość cząstki maleje monotonicznie, zgodnie z (14.6), do wartości u_z (która w tym przypadku jest stała; w przeciwnym razie opis ruchu byłby zależny od konkretnego rozkładu tej składowej prędkości), przy czym odbywa się to w skończonym czasie t_p , wobec (14.1) równym

$$t_p = \frac{1}{\sqrt{AB}} \operatorname{arctg} \frac{v_{coz} - u_z}{\sqrt{A/B}}. \quad (14.15)$$

Od tego momentu ruch opisany jest równaniem (14.7), a jego rozwiązanie (14.13) ma ze wzrostem czasu granicę, równą

$$v_{cz}(t \rightarrow \infty) = v_{ckz} = u_z - \sqrt{A/B}. \quad (14.16)$$

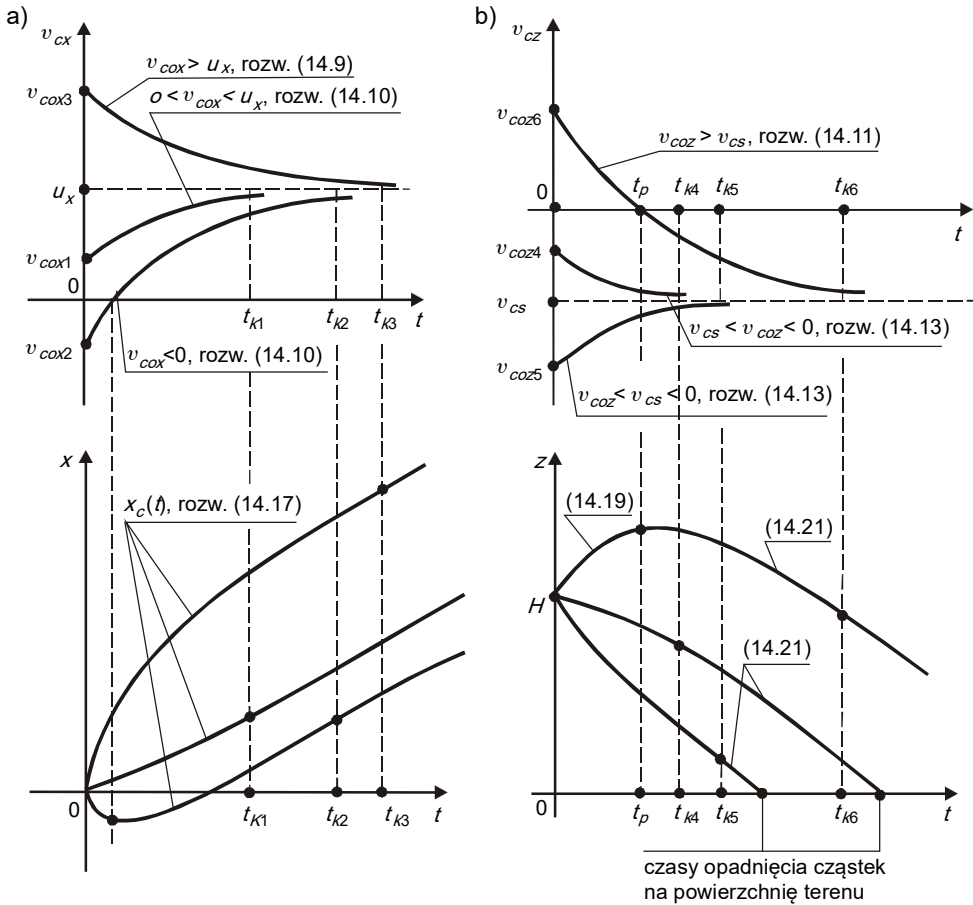
Jak widać, zmiana prędkości pionowej może przebiegać według większej liczby wariantów, niż prędkość pozioma. Z tego względu ograniczymy się do szczególnego przypadku, gdy $u_z = 0$ (zresztą bardzo często przyjmowanego w praktyce). Możliwe sytuacje obrazuje rys. 14.1b).

Możemy teraz przystąpić do wyznaczania składowych trajektorii cząstki. Jak widać z rys. 14.1c, droga przebyta przez cząstkę w kierunku poziomym narasta zależnie od początkowej wartości v_{cox} . Jeżeli jest ona ujemna (czyli gdy cząstkę wprowadzamy do strumienia „pod prąd” lub „pod wiatr”), wtedy przebywa ona pewien dystans Δx_p przeciwnie do dodatniego zwrotu osi $0x$, aż do wyzerowania swej energii początkowej, a następnie ulega przy-

spieszeniu. Funkcję $x_c(t)$ znajdujemy całkując (14.9) i (14.10). Zmianę znaku w mianownikach obu tych wyrażeń możemy uwzględnić poprzez wprowadzenie znaku wartości bezwzględnej, pisząc

$$x_c(t) = x_{co} + u_x t + \frac{v_{cox} - u_x}{B|v_{cox} - u_x|} \ln(1 + B|v_{cox} - u_x|t). \quad (14.17)$$

Charakterystyczne przebiegi tej funkcji pokazano na rys. 14.1c.



Rys. 14.1. Kinematyczne charakterystyki ruchu cząstki zawieszony

Dla kierunku pionowego musimy rozważyć kolejne warianty sytuacji początkowej. Jeżeli $v_{coz} > 0$, wtedy całkując (14.11) i wykorzystując warunek początkowy

$$t = 0: z_c = z_{co} = H, \quad (14.18)$$

otrzymujemy

$$z_c(t) = z_{co} + u_z t + \frac{1}{B} \ln \left| \frac{\cos(\arctg P - \sqrt{AB}t)}{\cos(\arctg P)} \right|. \quad (14.19)$$

Funkcja ta opisuje wznoszący się fragment trajektorii cząstki (rys. 14.1d), do wartości $z_c = z_{cp}$ w chwili $t = t_p$, opisanej wzorem (14.15). Następnie cząstka przez moment „zawisa” w płynie i zaczyna opadać ku dołowi. Jej trajektoria jest opisana równaniem (14.13), z warunkiem początkowym

$$t = t_p: z_c = z_{cp} = z_c(t = t_p). \quad (14.20)$$

Rozwiązanie dla tego przypadku ma postać

$$z_c(t) = z_{cp} + u_z(t - t_p) - \frac{1}{B} \ln \left| \cosh [\sqrt{AB}(t - t_p)] \right|. \quad (14.21)$$

Gdy jednak $u_{coz} < u_z$, wtedy od samego początku stosujemy równanie (14.7). Całkując jego rozwiązanie (14.13) względem czasu, mamy

$$z_c(t) = z_{co} + u_z t + \frac{1}{B} \ln \left| \frac{\cosh(\operatorname{artgh} P + \sqrt{AB}t)}{\cosh(\operatorname{artgh} P)} \right|. \quad (14.22)$$

Typowe wykresy $z_c(t)$ zaznaczono na rys. 14.1d.

14.3. Pozostałe metody rozwiązywania zadań

Obok omówionych wyżej metod analitycznych, do rozwiązywania równań opisujących trajektorie charakterystycznych cząstek zawiesiny możemy stosować także metody przybliżone analityczne, przybliżone graficzne oraz przybliżone numeryczne. Praktyczne znaczenie, i to ogromne, ma ta ostatnia kategoria metod. Należy je stosować wszędzie tam, gdzie pole prędkości płynu ma zbyt złożoną postać, by można je było opisać funkcją w postaci analitycznej. W szczególności są one przydatne przy opisie pracy urządzeń do oczyszczania wody i ścieków (np. [63, 140]).

Przykład 14.1

Przeanalizować możliwości usuwania cząstek zawiesiny w piaskowniku napowietrzanym.

Rozwiązanie

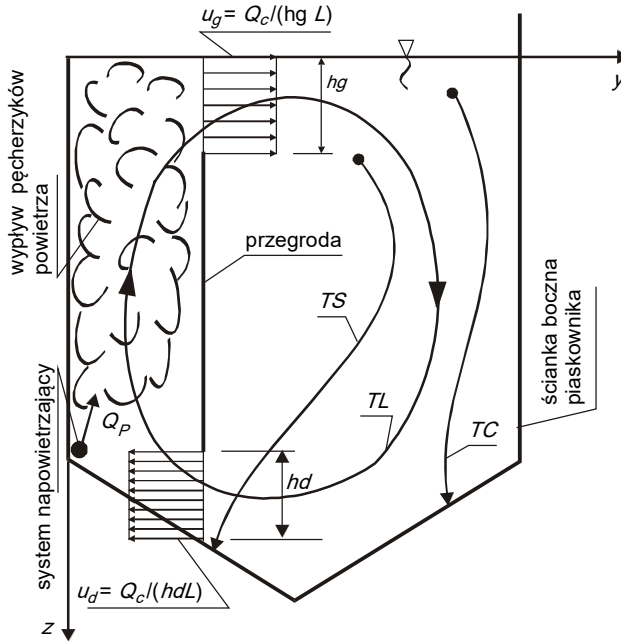
Przyjmijmy, że przekrój poprzeczny komory piaskownika o długości L ma kształt jak na rys. 14.2. Powietrze, wtłaczane przez system aeracyjny z wydatkiem Q_p , indukuje w komorze cyrkulację poprzeczną o wydatku Q_c [114]. Cyrkulacja ta nakłada się na przepływ wzdłuż komory, tworząc ruch o charakterze spiralnym. Jego intensywność musi być tak dobrana, aby małe cząstki utrzymywane były w zawieszeniu i opuszczały piaskownik wraz ze ściekami, natomiast aby cząstki większe (o średnicy zastępczej przekraczającej wartości 0,1 – 0,2 mm) opadały na dno komory. Tak więc kluczowe znaczenie ma wyznaczenie trajektorii cząstek w przekroju poprzecznym tego obiektu.

Opiszmy te trajektorie równaniami (12.3) i (12.68). Prędkości ścieków można wyznaczyć z różną dokładnością [134]. Szczególnie dogodny jest w takim przypadku *model bi-harmoniczny* [118], w którym funkcję prądu przepływu poprzecznego Ψ określa równanie

$$\Delta\Delta\Psi = 0. \quad (14.23)$$

Jeżeli prędkość przepływu ponad i pod przegrodą wewnętrzną opisać wartościami średnimi (rys. 14.2), to jako warunki brzegowe dla ostatniego równania możemy przyjąć:

- wzdłuż obwodu komory $\Psi = 0, \quad \partial\Psi/\partial n = 0;$
 — wzdłuż przegrody $\Psi = Q_c/L, \quad \partial\Psi/\partial n = 0.$



Rys. 14.2. Ruch cząstki w przekroju poprzecznym piaskownika napowietrzanego (przykład 14.1)

Rozwiązując omówione wyżej równania numerycznie (metodą różnic skończonych [157]), otrzymamy poszukiwane trajektorie cząstek. Nie wnikając w same procedury obliczeniowe, ograniczmy się tylko do wypunktowania istotnych wniosków końcowych. Możemy mianowicie wyróżnić trzy typy trajektorii. Cząstki „ciężkie” (TC na rys. 14.2) opadają w komorze na dno. Miejsce przecięcia toru takiej cząstki z linią dna wyznacza punkt sedimentacji cząstki. Cząstki „lekkie” (TL) są unoszone przez cyrkulację poprzeczną, co oznacza, że nie zostaną one w piaskowniku usunięte. Wreszcie cząstki „pośrednie” (TS) w zasadzie zbliżają się do dna komory, lecz ich trajektorie zbliżają się do dolnej części przegrody wewnętrznej, gdzie pojawia się silny prąd wznoszący. Oznacza to, że część tego typu cząstek może opaść, a część – opuścić komorę.

Omówiony wyżej sposób postępowania może być wykorzystany do rozwiązywania zadań praktycznych. Możemy albo projektować z jego pomocą nowe obiekty (dobierając wymiary piaskownika tak, by spełniał swe zadania), albo też sprawdzać teoretyczną efektywność urządzeń już istniejących. □

15. PRAKTYCZNA WERSJA METODY STRUKTURALNEJ

15.1. Stosowanie pełnej wersji metody

Istotą *metody strukturalnej* jest wyznaczanie trajektorii cząstek charakterystycznych dla rozważanego przypadku emisji zanieczyszczeń do odbiornika. Analiza przebiegu tych trajektorii pozwala na sformułowanie wniosków odnośnie do przebiegu migracji tej formy zanieczyszczenia wody lub powietrza. W szczególności zetknięcie się trajektorii z granicą obszaru traktujemy jako wskaźnik usunięcia zawiesiny z płynu (w drodze *sedymentacji*, jeśli opada ona ku dołowi, zaś *flotacji* – jeśli wypływa ku górze).

Wyznaczanie tych trajektorii jest często zadaniem dwustopniowym – najpierw obliczamy prędkość cząstki, a następnie jej tor (choć można wyznaczać trajektorie bezpośrednio z równania (12.4)). Jest to zadanie dość uciążliwe, więc celowe jest wykorzystanie pewnych specyficznych cech funkcji, opisujących prędkość cząstki. Pozwalają one na sformułowanie ważnych wniosków praktycznych.

15.2. Prędkość swobodnego opadania cząstki

W omówionych w podrozdz. 14.2 analitycznych rozwiązaniach równania ruchu cząstek zawiesiny występuje pewna kombinacja parametrów zjawiska, oznaczona tam symbolem $\sqrt{A/B}$ (np. w równaniu (14.16)). Analiza fizycznego sensu ogólnego równania ruchu (12.68) dla warunków ustalonych (gdy $d/dt = 0$) pozwala stwierdzić, że kombinacja ta określa końcową prędkość pionowego ruchu cząstki w cieczy nieruchomej (gdy $\mathbf{u} = 0$). Z tego względu nazywamy ją *prędkością swobodnego opadania* (lub *prędkością swobodnej flotacji*, gdy gęstość cząstki jest mniejsza od gęstości płynu, skutkiem czego cząstka wypływa ku górze). Oznaczmy tę prędkość symbolem v_{cs} . Uwzględniając (14.2) i (14.3), mamy

$$v_{cs} = \sqrt{\frac{2(\rho_c - \rho)V_c g}{C_D F_C \rho}}. \quad (15.1)$$

W ruchu laminarnym, gdy $C_D = 24/Re$, możemy napisać, że

$$v_{cs} = \frac{(\rho_c - \rho)V_c g R}{6F_C \rho v}. \quad (15.2)$$

Dla cząstek kulistych o promieniu R otrzymamy

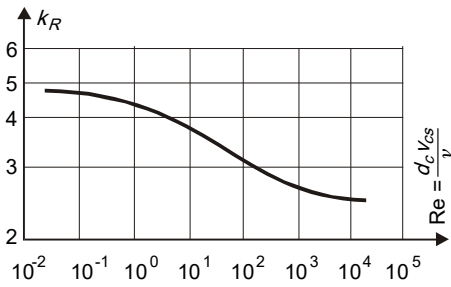
$$v_{cs} = \sqrt{\frac{8(\rho_c - \rho)gR}{3C_D\rho}}. \quad (15.3)$$

Prędkość swobodnego opadania jest bardzo ważnym parametrem, charakteryzującym dynamiczne własności cząstki (pkt 11.2.2.7). Pozwala ona na czytelną interpretację zależności (14.16), która wraz z (14.14) wyraża logiczny wniosek, że *końcowa prędkość cząstki jest równa wektorowej różnicy między prędkością płynu a prędkością swobodnego opadania cząstki* ($\mathbf{v}_{cs} = v_{cs} \mathbf{k}$), czyli

$$\mathbf{v}_{ck} = \mathbf{u} - \mathbf{v}_{cs} \text{ (opadanie)}. \quad (15.4)$$

Gdy $\rho_c < \rho$, wtedy mamy do czynienia z *prędkością swobodnej flotacji* i zamiast (15.4) piszemy

$$\mathbf{v}_{ck} = \mathbf{u} + \mathbf{v}_{cs} \text{ (wypływ ku górze)}. \quad (15.5)$$



Rys. 15.1. Wykładnik potęgi we wzorze (15.6)

Niesłychanie ważną cechą prędkości v_{cs} jako parametru cząstki jest możliwość jego doświadczalnego wyznaczenia. Jest to szczególnie ważne dla cząstek odkształcalnych, które po oddzieleniu od zawiesiny zmieniają swój kształt (np. kłaczkosady czynnego), co uniemożliwia określenie ich efektywnych wymiarów. Wyznaczamy wtedy v_{cs} eksperymentalnie, co daje możliwość zastosowania dla tych cząstek metody strukturalnej.

W dotychczasowych rozważaniach przyjmowaliśmy, że cząstka poruszająca się w płynie nie podlega wpływom cząstek sąsiednich. Jak pokazują obserwacje [89], założenie to jest dopuszczalne wtedy, gdy stosunek średniej odległości między cząstkami do ich przeciętnej średnicy nie jest mniejszy od 10. Odpowiada to stężeniu objętościowemu zawiesiny $c_V = 0,1\%$. W praktyce przyjmuje się nawet, że można pomijać ten wpływ nawet dla stężeń objętościowych do $c_V = 1\%$. Dla większych stężeń zawiesiny posługujemy się skorygowaną prędkością v_{cs} , noszącą nazwę *prędkości skrzepowanego opadania* v_{ss} . Można tu korzystać ze wzoru [92]

$$v_{ss} = v_{cs}(1 - c_V)^k. \quad (15.6)$$

Wartość wykładnika k_R można odczytać z wykresu na rys. 15.1.

Pewien wpływ na opadanie bardzo drobnych cząstek zawiesiny mogą też wywierać *ruchy Browna* [89]. Dokładny opis tego zjawiska byłby bardzo trudny. W praktyce także tutaj możemy uwzględnić ten czynnik, zastępując prędkość swobodnego opadania przez wartość v_{cb} , zgodnie z relacją

$$v_{cb} = v_{cs} (1 + 2K l_o/d_c), \quad (15.7)$$

gdzie

$$K = 1,25 + 0,42 \exp(-0,55 d_c/l_o) \quad (15.8)$$

(d_c – średnica miarodajna cząstki, l_o – średnia droga swobodna molekuł płynu).

15.3. Możliwość uproszczenia metody strukturalnej

Powyżej stwierdziliśmy, że prędkość cząstki w warunkach ustalonych (gdy $\mathbf{u} = \text{const}$, co często zakładamy w praktyce) dąży do stałej wartości (15.4) lub odpowiednio (15.5). Przebiega to co prawda w sposób asymptotyczny, lecz po upływie pewnego skończonego okresu czasu t_k możemy w praktyce przyjąć, że prędkość ta w pomijalnym stopniu różni się od obliczeniowej prędkości końcowej v_{ck} . W takim momencie trajektorie cząstek stają się liniami praktycznie prostymi (rys. 14.1c,d), co jest istotną cechą, ułatwiającą rozwiązywanie zadań.

Nasuwa się więc oczywiste pytanie, jak długi jest czas t_k . Gdyby bowiem był on dużo krótszy od czasu trwania całego zjawiska (np. od czasu opadania cząstki na dno zbiornika), to moglibyśmy w takich przypadkach pomijać etap ustalania się prędkości.

Ze względu na asymptotyczny sposób zbliżania się v_c do jej wartości końcowej przyjmijmy, że za stan końcowy uznamy sytuację, gdy prędkość cząstki różni się od obliczeniowej wartości końcowej o 1%. Z równań (14.9) i (14.10) mamy wtedy

$$t_{kx} = \frac{100|v_{cox} - u_x| - u_x}{Bu_x|v_{cox} - u_x|}. \quad (15.9)$$

Dla składowej pionowej musimy rozważyć równanie (14.13). Przyjmując tu kryterium zbieżności na poziomie 1% prędkości swobodnego opadania, mamy

$$t_{kz} = \frac{2,65}{\sqrt{AB}}. \quad (15.10)$$

Konkretne wartości czasu ustalania się prędkości zależą, jak widać, zarówno od własności cząstki, jak też od własności płynu i warunków ruchu. Zakres interesujących nas sytuacji można wyznaczyć przez dwa charakterystyczne przypadki: z jednej strony ruch pęcherzyków powietrza w wodzie, zaś z drugiej – ruch cząstek piasku w powietrzu. Przyjmując średnice cząstek równe 1,0 mm, obliczymy z powyższych wzorów, że czas ustalania się prędkości w kierunku poziomym waha się w granicach od 0,1 s (pęcherzyki powietrza) do kilkudziesięciu sekund (ziarna piasku). W kierunku pionowym mamy zakres zmienności czasu od 0,01 s (pęcherzyki powietrza) do 2,0 s (piasek).

Jest więc zrozumiałe, że dla niektórych sytuacji możemy pominąć etapy ruchu nieustalonego i przyjąć założenie, że w *każdym momencie ruchu prędkość cząstki zawiesziny jest praktycznie równa prędkości końcowej* według (15.4) lub odpowiednio (15.5). Założenie to można zaakceptować dla tak ważnych w inżynierii sanitarnej sytuacji, jak ruch osadu czynnego w ściekach, opadanie kłaczków osadu, powstającego w trakcie koagulacji, ruch pęcherzyków powietrza, wtłaczanych do wody lub ścieków za pomocą systemów napowietrzających, a nawet do opisu ruchu zawiesziny w piaskownikach i osadnikach wstępnych [97, 174].

Nie należy przyjmować takiego założenia dla cząstek piasku, przenoszonego w strumieniu powietrza. Można to potwierdzić także prostą obserwacją systemów, służących do piaskowania powierzchni metalowych, lub obserwacją burzy piaskowej (strumień powietrza skręca gwałtownie przed przeszkodą, a cząstki piasku, nie nadążając za powietrzem, uderzają w przeszkodę).

15.4. Model praktyczny

W wyniku powyższych oszacowań możemy przyjąć, że jeśli czas dochodzenia prędkości cząstki \mathbf{v}_c do jej obliczeniowej wartości końcowej \mathbf{v}_{ck} , obliczony ze wzorów (15.6) i (15.7), jest pomijalnie krótki w porównaniu z czasem trwania zjawiska oraz z czasem ewentualnej zmiany warunków ruchu płynu, to możemy przyjąć, że

$$\frac{d\mathbf{r}_c}{dt} = \mathbf{u} \pm \mathbf{v}_{cs}. \quad (15.11)$$

Często w zagadnieniach inżynierskich możemy traktować przepływ jako płaski. Mamy wtedy

$$\frac{dx_c}{dt} = u_x, \quad \frac{dz_c}{dt} = u_z - v_{cs}. \quad (15.12)$$

Dzieląc obie te zależności stronami przez siebie eliminujemy czas t i otrzymujemy równanie różniczkowe, bezpośrednio opisujące kształt trajektorii cząstki, postaci

$$\frac{dz_c}{dx_c} = \frac{u_z(x, z) - v_{cs}}{u_x(x, z)}. \quad (15.13)$$

Dla stałej i poziomej prędkości płynu, mamy wtedy

$$z_c = -\frac{v_{cs}}{u_x} x_c + C. \quad (15.14)$$

Trajektorie cząstek są w takim przypadku liniami prostymi, co bardzo upraszcza projektowanie obiektów technicznych. Ważne jest jednak, aby omawiane tu uproszczenie wykorzystywać w sposób kontrolowany, wykonując oszacowania błędów popełnianych wskutek pomijania ewentualnej zmienności pola prędkości.

Jak już wspomnieliśmy, przecięcie linii (15.8) z granicą obszaru traktujemy jako moment usunięcia cząstki z płynu. Opisywana tu wersja metody strukturalnej nie daje możliwości uwzględnienia procesów ponownego poderwania cząstki (na przykład z dna zbiornika) i ponownego jej wprowadzenia do zawiesiny. Opis takiego zjawiska jest bardzo złożony, gdyż unoszenie cząstek jest uwarunkowane trudnymi do wyznaczenia siłami spójności tej cząstki z brzegiem obszaru (rys. 12.1). W tych dziedzinach techniki, w których to zjawisko odgrywa dużą rolę (np. transport hydrauliczny, regulacja rzek, ochrona brzegów morskich), formułuje się pewne koncepcje i metody jego opisu. W zagadnieniach migracji zanieczyszczeń można posłużyć się metoda uproszczoną.

Polega ona na porównaniu prędkości płynu (najczęściej średniej) z empirycznie wyznaczonymi prędkościami kryterialnymi. Są nimi *prędkość niezamulająca* v_{nz} oraz *prędkość nierozmywająca* v_{nr} . Pierwsza z nich jest określona przez taką średnią prędkość ruchu płynu, powyżej której nie następuje opadanie cząstek zawieszonych. Jest ona różna dla różnych frakcji zawiesiny. Przykładowo, dla piasku w wodzie wynosi ona 0,20 m/s, zaś dla żwiru w wodzie – 0,31 m/s. Z kolei wartość v_{nr} określa maksymalną prędkość średnią, dla której jeszcze nie następuje podnoszenie materiału ziarnistego z dna strumienia. Dla piasku mamy tu 0,45 m/s, zaś dla żwiru – 1,00 m/s. Jak widać, możemy zdefiniować trzy zakresy prędkości średnich płynu:

- 1) gdy $u < v_{nz}$ – wtedy cząstki zawieszony w płynie będą ulegały sedymentacji; do opisu ich ruchu możemy zastosować *metodę strukturalną*;
 - 2) gdy $v_{nz} < u < v_{nr}$ – cząstki zawieszony nie będą opadały, lecz nie będziemy też obserwować podnoszenia cząstek z dna;
 - 3) gdy $u > v_{nr}$ – zawiesina nie opada, a w dodatku płyn porywa z dna nowe cząstki.
- W przypadkach 2 i 3 nie możemy stosować metody strukturalnej, w jej podstawowej wersji łączy się ją wtedy na przykład z modelami o charakterze stochastycznym..

Przykład 15.1

Komin o wysokości $H = 100,0$ m emituje do atmosfery strumień pyłów o łącznej intensywności $M_P = 1500$ t/rok. Pył ten można podzielić na trzy frakcje ($K = 3$), charakteryzujące się średnimi prędkościami swobodnego opadania

$$v_{cs1} = 0,4 \text{ m/s} \quad - \quad p_{f1} = 25\%;$$

$$v_{cs2} = 0,6 \text{ m/s} \quad - \quad p_{f2} = 35\%;$$

$$v_{cs3} = 0,8 \text{ m/s} \quad - \quad p_{f3} = 40\%$$

(symbol p_{fi} oznacza tu procentowy udział i -tej frakcji w strumieniu pyłu).

Wykonać mapę przeciętnego rocznego opadu pyłu w rejonie kominu.

Rozwiązanie

Zakładając warunki ustalone (gdyby prędkość i kierunek wiatru były niezmiennie), moglibyśmy w rozważanym przypadku zastosować praktyczną wersję metody strukturalnej, traktując tory cząstek pyłu jako prostoliniowe. Odległości od kominu L_i , w jakich poszczególne frakcje będą opadały na ziemię, można wtedy obliczyć z zależności (15.14). Wyznaczając stałą całkowania z warunku początkowego ($x_c = 0$ gdy $z_c = H$), otrzymujemy w takim przypadku

$$L_i = wH/v_{cgi}. \quad (15.15)$$

Dla trzech frakcji mamy trzy różne odległości L_i (dla każdej z prędkości wiatru w).

Jednakże – zgodnie z treścią zadania – musimy określić opad pyłu w skali całego roku, co wymaga uwzględnienia zmian kierunku i prędkości wiatru. Rzecz oczywista, ścisły opis tej wielkości byłby bardzo zawiły, a ponadto mógłby dotyczyć tylko stanów przeszłych (dokładność prognoz meteorologicznych jest bowiem ograniczona).

W tej sytuacji można zaproponować rozwiązanie pośrednie, bazujące na typowej syntetycznej charakterystyce prędkości wiatru, jaką stanowi *róża wiatrów*. Przyjmijmy, że w rozważanym rejonie panują wiatry o prędkościach miarodajnych $w_1 = 5,0$ m/s oraz $w_2 = 10,0$ m/s. Różę wiatrów dla tych prędkości pokazano na rys. 15.2a.

Zgodnie z (15.15), dla każdego z trzech typów cząstek oraz dla każdej z dwóch prędkości wiatru możemy wyznaczyć 6 obliczeniowych zasięgów cząstek L_{kj}

$$L_{11} = 1250 \text{ m}, L_{12} = 2500 \text{ m}, L_{21} = 833 \text{ m},$$

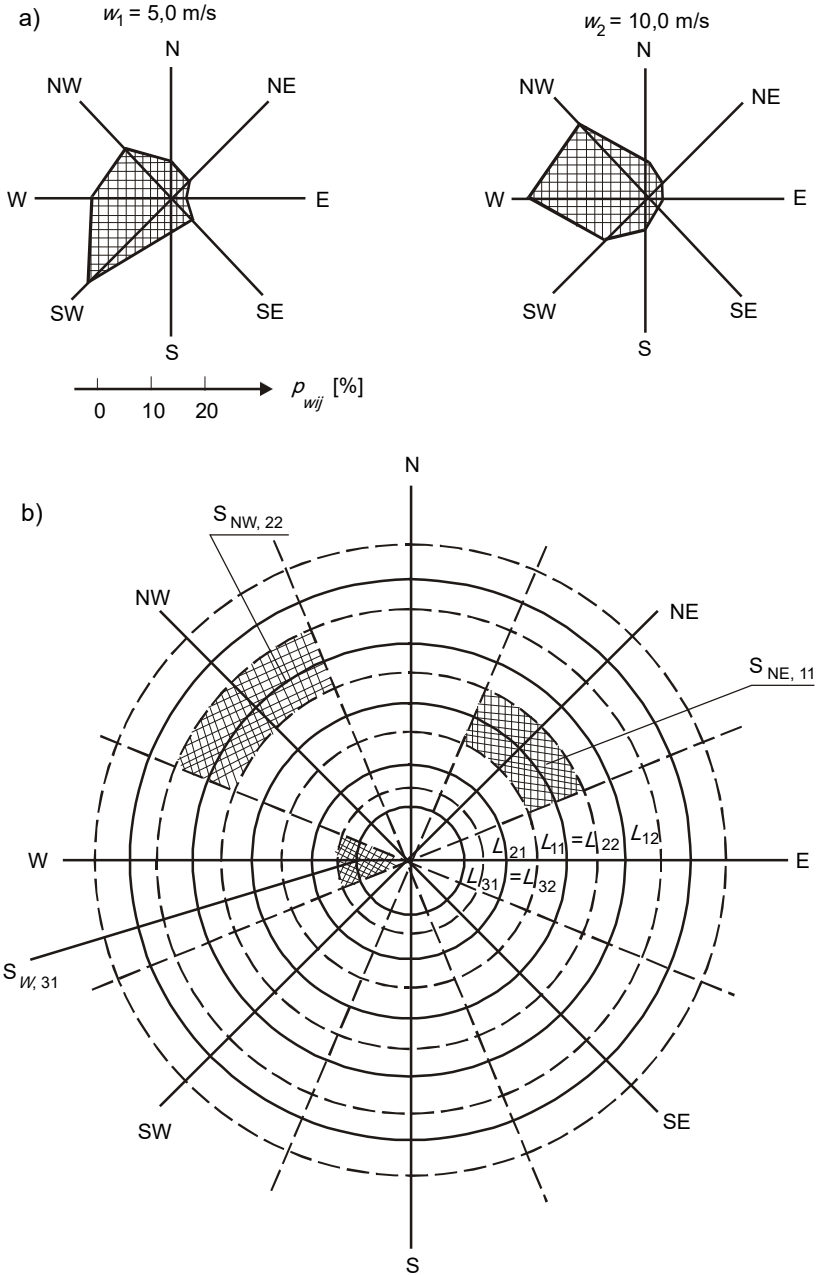
$$L_{22} = 1667 \text{ m}, L_{31} = 625 \text{ m}, L_{32} = 1250 \text{ m}.$$

Nie zależą one od kierunku wiatru, toteż tworzą pięć (bo w tym przypadku $L_{11} = L_{32}$) koncentrycznych kręgów (rys. 15.2b). Ich punkty przecięcia z każdym z $i = 1, 2, \dots, 8$ kierunków róży wiatrów wyznaczają obliczeniowe punkty sedymentacji zawieszony. Każdemu z tych 40 punktów możemy przyporządkować pole powierzchni S_{ij} , zgodnie z rys. 15.2b.

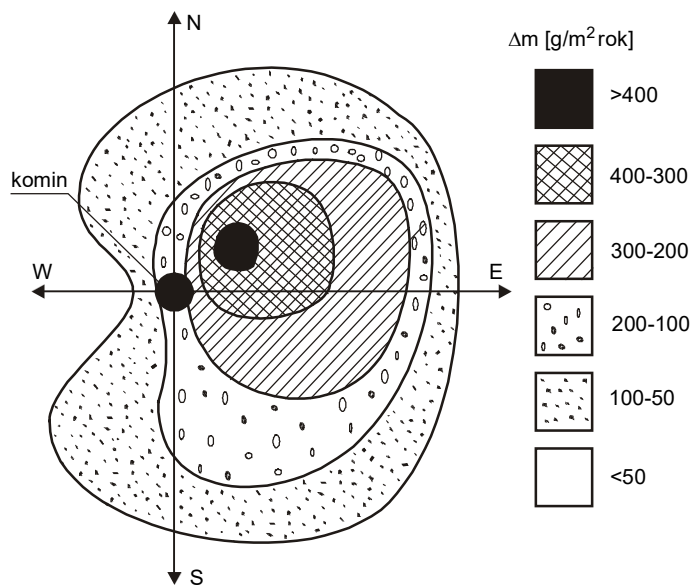
Przyjmijmy teraz, że rozdział strumienia masy pyłów M_P na poszczególne pola S_{ij} odbywa się proporcjonalnie do częstości wiatru p_{wi} (rys. 15.2a), oraz do znanych udziałów masowych p_{fk} , możemy następująco obliczyć jednostkowy opad pyłu w rejonie kominu:

$$m_{ijk} = M_P p_{fk} p_{wl} / S_{ij}$$

Uzyskane wyniki przedstawiono na rys. 15.3, w postaci planu warstwicowego opadu pyłu.



Rys. 15.2. Schemat obliczeniowy do przykładu 15.1



Rys. 15.3. Rozwiązanie przykładu 15.1



16. OPIS RUCHU ZAWIESINY METODĄ FENOMENOLOGICZNĄ

Podstawową metodą opisu ruchu zawiesiny jest z definicji metoda strukturalna. Jednakże po przedstawieniu jej opisu możemy stwierdzić, że istnieje możliwość zastosowania do opisu migracji zawiesin także pewnych modeli metody fenomenologicznej.

Wiemy już, że prędkość cząstki zawiesiny dąży do prędkości płynu nośnego, skorygowanej prędkością swobodnego opadania zgodnie z (15.4) lub (15.5) w przypadku zawiesiny makroskopowej.

Jeśli zaś chodzi o roztwory, to w dokładnym ujęciu masa substancji rozpuszczonej porusza się z prędkością nośnika (adwekcja), a ponadto ulega dyfuzji molekularnej. Spowodowana jest ona chaotycznym ruchem cząsteczek materii, który w znikomym stopniu wpływa na ruch zawiesiny. Jedynie bardzo drobne jej cząstki reagują na ten czynnik, wykonując *ruchy Browna*. Uwzględniamy go niekiedy przy wyznaczaniu prędkości swobodnego opadania najdrobniejszych cząstek zawiesiny makroskopowej (wzory (15.7) i (15.8)), lecz nie jest on na tyle intensywny, aby rozważać dyfuzję molekularną zawiesin, nawet koloidalnych (pkt 4.4.2.3).

Inaczej jednak rzecz się ma dla dwóch pozostałych głównych modeli metody fenomenologicznej – uwzględniających dyfuzję burzliwą oraz dyspersję. Każdy z tych procesów ruchu względego jest na tyle silny, że z całą pewnością podlegają im cząstki zawiesiny koloidalnej. Uwzględniając brak sedimentacji tej klasy cząstek, możemy sformułować bardzo ważny wniosek. Mianowicie *model adwekcji-dyfuzji burzliwej oraz model adwekcji-dyspersji można stosować także do opisu migracji zawiesiny koloidalnej*. Wniosek ten bardzo często wykorzystuje się w praktyce.

Chcąc skorzystać z tej możliwości do opisu ruchu zawiesin makroskopowych, musimy rozważyć kwestię jej separacji grawitacyjnej. Czynniki ten nie jest objęty równaniami metody fenomenologicznej, więc w ujęciu dokładnym tego atrakcyjnego modelu nie możemy tu zastosować. Została jednak sformułowana pewna możliwość przybliżona. Bazuje ona na stwierdzeniu, że jednostkowy strumień zawiesiny, spowodowany sedimentacją (lub flotacją) z prędkością swobodnego opadania v_{cs} , równy

$$m_s = - v_{cs} c, \quad (16.1)$$

ma formalnie podobny charakter do strumienia adwekcyjnego w kierunku pionowym, równego

$$m_{az} = - u_z c. \quad (16.2)$$

Uwzględniając, że zawiesina podlega dyfuzji turbulentnej, możemy następująco zapisać równanie (6.101) metody fenomenologicznej dla zawiesiny [5]:

$$\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + \bar{u}_x \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} + \bar{u}_y \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} + (\bar{u}_z - v_{csi}) \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} = \text{div}(D_T \text{grad } \bar{c}_i) + \bar{Z}_i. \quad (16.3)$$

Indeksem i oznaczono tu tę frakcję zawiesiny, dla której prędkość swobodnego opadania wynosi v_{csi} . Tak więc równanie (16.3) musimy napisać dla każdej z frakcji oddzielnie.

Pewna odmiana omówionej tu metody powstaje wtedy, gdy grawitacyjny strumień zawiesiny wyrazimy nie relacją typu adwekcyjnego (16.1), lecz zależnością typu dyfuzyjnego, co jest równoznaczne z korektą współczynnika dyfuzji w kierunku pionowym. Można wtedy zamiast (6.101) napisać, że [145]

$$\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla) \bar{c}_i = \text{div} \left[D_T \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} \mathbf{i} + D_T \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial y} \mathbf{j} + D_T^S \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial z} \mathbf{k} \right] + \bar{Z}_i. \quad (16.4)$$

gdzie skorygowany współczynnik dyfuzji burzliwej w kierunku pionowym jest równy

$$D_T^S = D_T + \frac{v_{cs}}{g} \|v'_z\|. \quad (16.5)$$

Jak widać, niezbędne jest tu wyznaczenie (lub przynajmniej oszacowanie) średniokwadratowej prędkości pulsacji.

Zasady formułowania i rozwiązywania zagadnień, w których ruch zawiesiny opisujemy przedstawionymi wersjami równań metody fenomenologicznej, są oczywiście takie same, jak dla typowych wersji tej metody (podrozdz. 4.11).

Tablice pomocnicze

Tablica 1

Parametry molekuł niektórych gazów (w temp. 0°C, pod ciśnieniem atmosferycznym)

Gaz	Średnica molekuly [m]	Średnia droga swobodna [m]	Średnia prędkość molekuly [m/s]	Liczba zderzeń międzycząsteczkowych [1/sek]
wodór	$2,74 \cdot 10^{-10}$	$11,1 \cdot 10^{-8}$	1696	$15,3 \cdot 10^{-9}$
hel	$2,18 \cdot 10^{-10}$	$17,5 \cdot 10^{-8}$	1208	$6,9 \cdot 10^{-9}$
azot	$3,78 \cdot 10^{-10}$	$5,9 \cdot 10^{-8}$	454	$7,8 \cdot 10^{-9}$
tlen	$3,64 \cdot 10^{-10}$	$6,3 \cdot 10^{-8}$	425	$6,7 \cdot 10^{-9}$
dwutlenek węgla	$4,66 \cdot 10^{-10}$	$3,9 \cdot 10^{-8}$	362	$9,4 \cdot 10^{-9}$

Tablica 2

Rodzaje zdyspergowanych układów złożonych

Składniki		Roztwory	Zawiesiny	
ośrodek rozpraszający	substancja rozpuszczona		koloidalne	makroskopowe
gaz	gaz	mieszanki gazów (np. powietrze)	–	–
	ciecz	–	mgła	deszcz
	ciało stałe	–	dym papierosowy	grad
ciecz	gaz	roztwory gazów (np. tlen w wodzie)	piana	pęcherzyki CO ₂ w wodzie sodowej
	ciecz	mieszanki cieczy (np. alkohol i woda)	emulsja (np. mleko)	kropelki oliwy w wodzie
	ciało stałe	roztwory ciał stałych (np. NaCl w wodzie)	zól (np. purpura Kasjusza)	błoto
ciało stałe	gaz	np. wodór rozpuszczony w palladzie	stała piana (np. pumeks)	powietrze w glebie
	ciecz	woda wewnętrzściowa	stała emulsja	woda w szczelinach skał
	ciało stałe	niektóre stopy metaliczne	stały zól	niektóre skały (np. granit)

Tablica 3

Stężenie nasycenia niektórych soli w wodzie (w temp. 20°C, pod ciśnieniem atmosferycznym, w gramach soli na 100 g wody) wg [10]

Kation	Anion					
	Cl ⁻	Br ⁻	I ⁻	NO ₃ ⁻	SO ₄ ²⁻	CO ₃ ²⁻
Na ⁺	35,8	90,5	184,0	88,0	19,4	21,6
K ⁺	34,4	54,0	144,3	31,6	11,1	112,0
NH ₄ ⁺	29,7	77,0	172,0	187,7	75,4	100,0
Mg ²⁺	54,3	101,5	148,0	70,5	26,7	0,18
Ca ²⁺	74,5	142,0	204,0	127,0	0,2	1,5 · 10 ⁻³
Ba ²⁺	37,5	104,0	170,0	9,0	2,5 · 10 ⁻⁴	1,7 · 10 ⁻³
Cu ²⁺	70,6	122,0	–	122,0	21,0	–
Ag ⁺	1,5 · 10 ⁻⁴	1,4 · 10 ⁻⁵	0,3 · 10 ⁻⁶	218,0	0,8	0,3 · 10 ⁻³
Zn ²⁺	367,0	447,0	432,0	327,0	54,0	6 · 10 ⁻⁵
Hg ²⁺	6,6	0,6	0,01	127,0	–	–

Tablica 4

Stężenie nasycenia niektórych gazów w wodzie
(dla różnych temperatur, pod ciśnieniem atmosferycznym, w m³ gazu na m³ wody) wg [10]

Gaz	Temperatura [°C]						
	0	10	20	30	40	50	60
azot	0,0236	0,0190	0,0160	0,0140	0,0125	0,0113	0,0102
amoniak	1300	910	710	595	–	–	–
dwutlenek węgla	1,713	1,194	0,0878	0,66	0,53	0,44	0,36
chlor	–	3,148	2,299	1,799	1,438	1,225	1,023
chlorowódór	507	474	442	412	386	362	339
powietrze	0,0288	0,0226	0,00187	0,0161	0,0142	0,0130	0,0122
tlen	0,049	0,038	0,031	0,026	0,023	0,021	0,019
wódór	0,0215	0,0198	0,0184	0,0170	0,0164	0,0161	0,0160

Tablica 5

Współczynniki dyfuzji molekularnej niektórych gazów w powietrzu (w temp. 20°C)

Gaz dyfundujący	D _M [m ² /s]	Gaz dyfundujący	D _M [m ² /s]
para wodna	0,0000219	jod	0,0000081
dwutlenek węgla	0,0000139	eter etylowy	0,0000079
amoniak	0,0000128	benzen	0,0000077
etanol	0,0000103	anilina	0,0000061

Tablica 6

Współczynniki dyfuzji molekularnej niektórych elektrolitów w wodzie (w temp. 20°C), 10^9 [m²/s]

Substancja	Stężenie roztworu (mol/dm ³)									
	0,000	0,001	0,003	0,005	0,010	0,05	0,1	0,5	1,0	3,0
BaCl ₂	1,385	1,320	1,283	1,265	1,256	1,179	1,159	1,151	1,179	1,291
CaCl ₂	1,335	1,249	1,201	1,179	1,173	1,121	1,101	1,140	1,203	1,265
LiCl	1,366	1,345	1,331	1,323	1,312	1,28	1,27	1,28	1,30	1,43
KCl	1,993	1,964	1,945	1,934	1,917	1,864	1,844	1,850	1,892	2,112
NaCl	1,610	1,585	1,570	1,560	1,545	1,507	1,483	1,474	1,484	1,565
ZnSO ₄	0,846	0,748	0,724	0,705	0,696	0,688	0,670	0,521	0,512	0,478
H ₂ SO ₄	1,960	1,940	1,920	1,881	1,900	1,921	1,928	1,940	2,020	2,312

Tablica 7

Współczynniki dyfuzji wodnych roztworów niektórych nieelektrolitów

Substancja rozpuszczona	$D_M \cdot 10^9$ [m ² /s]	Substancja rozpuszczona	$D_M \cdot 10^9$ [m ² /s]
wodór	3,36	chlor	1,40
tlen	2,60	mocznik	0,99
azot	2,02	kwask octowy	0,91
amoniak	1,78	gliceryna	0,63
dwutlenek węgla	1,71	nikotyna	0,53
siarkowodór	1,43	sacharoza	0,36

Tablica 8

Wybrane wartości $\sqrt{MT_c}$ do obliczeń według wzoru (4.137)

Gaz	$\sqrt{MT_c}$
H ₂ O	108,0
powietrze	61,9
CO ₂	115,5
CO	61,4
N ₂	59,5
O ₂	70,2
H ₂	8,13
CH ₄	55,1

Tablica 9

Dynamiczne współczynniki lepkości niektórych roztworów wodnych (wg [10]),
dla różnych stężeń masowych c_M [%], 10^3 [kg/ms]

Substancja rozpuszczona	t [°C]	10%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	90%	100%
HCl	20	1,16	1,36	1,70	–	–	–	–	–	–	–
HNO ₃	20	–	1,05	–	1,30	–	2,00	–	1,88	–	–
H ₂ SO ₄	20	1,12	1,38	1,82	2,48	3,58	5,52	9,65	23,2	23,1	27,8
NaCl	0	2,01	2,67	–	–	–	–	–	–	–	–
	20	1,19	1,56	–	–	–	–	–	–	–	–
NaOH	20	1,86	4,48	–	–	–	–	–	–	–	–
CH ₃ OH	0	2,59	3,23	3,51	3,65	3,35	2,89	2,37	1,76	1,19	0,82
	20	1,32	1,58	1,76	1,84	1,76	1,60	1,39	1,14	0,86	0,58
C ₂ H ₅ OH	0	3,311	5,319	6,94	7,14	6,58	5,75	4,762	3,690	2,732	1,773
	25	1,323	1,815	2,18	2,35	2,40	2,24	2,037	1,748	1,424	1,096
	50	0,734	0,907	1,050	1,132	1,155	1,127	1,062	0,968	0,848	0,702
CH ₃ COOH	20	1,22	1,45	1,70	1,96	2,21	2,43	2,66	2,75	2,43	1,22
C ₃ H ₈ O ₃ (gliceryna)	20	1,311	1,769	2,501	3,750	6,050	10,96	22,94	62,0	234,6	1499,0
C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	25	–	1,0794	1,1252	1,1744	1,2273	1,2840	1,3445	–	–	–

Tablica 10

Ciepło właściwe niektórych płynów

Płyn	C_w (J/kg K)	C_{ww} (J/kg K)	C_{wp} (J/kg K)
woda	4181,1	–	–
alkohol etylowy	2390,4	–	–
nafta	2091,6	–	–
terpentyna	1792,8	–	–
argon	–	320,0	533,0
azot	–	748,0	1050,0
hel	–	3170,0	5250,0
tlen	–	659,0	916,0
wodór	–	10200,0	14300,0

Tablica 11

Cząstkowe objętości właściwe ΔV_d [dm³/kg]

Jon	T = 0°C	T = 25°C	T = 50°C	T = 75°C
H ⁺	0,00	0,00	0,00	0,00
Na ⁺	-0,152	-0,053	-0,013	+0,035
K ⁺	+0,184	+0,231	+0,245	+0,264
F ⁻	-0,116	-0,061	-0,074	-0,163
Cl ⁻	+0,463	+0,502	+0,507	+0,490
OH ⁻	-0,400	-0,238	-0,256	-0,306
Br ⁻	+0,288	+0,309	+0,319	+0,314

Tablica 12

Intensywność poboru tlenu przez powierzchnię wody [g O₂/m²d], dla T = 20°C, wg [50]

Lp.	Rodzaj zbiornika	Stopień nasycenia [%]					
		100	80	60	40	20	0
1	mały staw	0	0,3	0,6	0,9	1,2	1,5
2	duże jezioro	0	1,0	1,9	2,9	3,8	4,8
3	rzeka wolno płynąca	0	1,3	2,7	4,0	5,4	6,7
4	duża rzeka	0	1,9	3,8	5,8	7,6	9,6
5	wody szybko płynące	0	3,1	6,2	9,3	12,4	15,5
6	bystrotok	0	9,6	19,2	28,6	38,4	48,0

Tablica 13

Współczynnik szorstkości n_s , do wzoru (10.10)

Lp.	Charakterystyka koryta rzeki	n_s
1	naturalne koryto, w bardzo dobrym stanie (czyste, proste, o swobodnym nurcie)	0,025
2	duża lub średnia stała rzeka równinna, w dobrym stanie i o korzystnych warunkach przepływu	0,033
3	względnie czyste koryto stałych równinnych cieków w zwykłych warunkach, kręte, z pewnymi zaburzeniami przepływu lub proste z nierównościami dna (kamienie, mielizny, zagłębienia)	0,04
4	koryta dużych i średnich rzek znacznie zanieczyszczone, kręte i porośnięte, kamieniste, z niespokojnym przepływem	0,05
5	rzeki typu górskiego, odcinki rzek nizinnych z progami	0,067
6	rzeki o słabym nurcie, zarośnięte, z dużymi nierównościami dna; rzeki górskie o zróżnicowanym dnie i zmiennym kształcie zwierciadła wody	0,08
7	rzeki o dużych mieliznach; rzeki górskie kręte, o wyraźnych przepadach	0,10
8	rzeki górskie jw. z wodospadami; rzeki błotniste, z zastoiskami	0,133
9	rzeki o dużych pływaczach, rzeki leśne	0,20

Tablica 14

Współczynnik dyfuzji atmosferycznej [m^2/s]

H_W [m]	$\omega_M = 0,2$		$\omega_M = 0,25$		$\omega_M = 0,33$		$\omega_M = 0,5$	
	D_{LH}	D_{LV}	D_{LH}	D_{LV}	D_{LH}	D_{LV}	D_{LH}	D_{LV}
0	0,42	0,24	0,24	0,14	0,15	0,09	0,12	0,07
10	0,42	0,24	0,24	0,14	0,15	0,09	0,12	0,07
15	0,24		0,14		0,09		0,07	
30	0,23		0,13		0,085		0,065	
60	0,19		0,11		0,07		0,055	
90	0,16		0,09		0,055		0,045	

Tablica 15

Wykładnik meteorologiczny

\tilde{W} [m/s]	2,0	5,0	7,0
g_T [$^{\circ}\text{C}/1000$ m]	0,2	0,6	1,0
ω_M	0,5	0,25	0,2

Tablica 16

Wartości współczynników oporu ciał

Charakterystyka opływu cząstki	C_D
półkula zakryta, napływ płynu na stronę wypukłą	0,40
jw., napływ na stronę płaską	1,17
półkula odkryta, napływ płynu na stronę wypukłą	0,34
jw., napływ na stronę odkrytą	1,33
okrągła płytka, prostopadła do wektora prędkości	1,11

BIBLIOGRAFIA

- [1] **Aksielrud G.A., Molczanow A.D.:** Rozpuszczanie ciał stałych. Warszawa: Wydawnictwa Naukowo-Techniczne **1981**.
- [2] **Allen J.R.L.:** Fizyczne procesy sedymentacji. Warszawa: PWN **1977**.
- [3] **Barnier M.:** Atlas wielkich zagrożeń. Warszawa: Wydawnictwa Naukowo-Techniczne **1995**.
- [4] **Bear J.:** Dynamics of fluids in porous media. New York: Elsevier **1972**.
- [5] **Bechteler W., Schrimpf W.:** Improved numerical model for sedimentation. J. Hydr. Eng. **1984** nr 3.
- [6] **Blumberg A.F.:** Numerical model of estuarine circulation. J. Hydr. Div. **1977** nr 3.
- [7] **Błaszczuk W.:** Projektowanie sieci kanalizacyjnych. Warszawa: Wydawnictwo Arkady **1963**.
- [8] **Bowden K.F.:** Horizontal mixing in the sea due to a shearing current. J. Fluid Mech. **1965** nr 21.
- [9] **Bowles D.S., Fread D.L., Grenney W.J.:** Coupled dynamic streamflow-temperature models. Journal Hydr. Div. **1977** nr 5.
- [10] **Bretsznajder S.:** Własności gazów i cieczy. Warszawa: Wydawnictwa Naukowo-Techniczne **1962**.
- [11] **Bronsztejn I.N., Siemiendiajew K.A.:** Matematyka – poradnik encyklopedyczny. Warszawa: PWN **1968**.
- [12] **Brooks N.H., Koh R.C.Y.:** Selective withdrawals from density stratified reservoirs. J. Hydr. Eng. **1969** nr 2.
- [13] **Camp T.R.:** Field estimates of oxygen balance parameters. J. Sanit. Eng. Div. **1965** nr 91.
- [14] **Cederwall K.:** Tracer studies on turbulent diffusion and dispersion. Proc. 12th Congress of IAHR. Fort Collins: IAHR **1967**.
- [15] **Chapra S.C.:** Surface water-quality modelling. New York: McGraw Hill Company **1994**.
- [16] **Chatwin P.C.:** The approach to normality of the concentration distribution of a solute in a solvent flowing along a pipe. J. Fluid Mech. **1970** nr 48.
- [17] **Chruściel S.:** Obliczanie stanu zanieczyszczenia atmosfery według wytycznych MAGTOŚ. Zeszyty Problemowe PZITS – Ochrona Atmosfery **1985** nr 13.
- [18] **Collatz L.:** Metody numeryczne rozwiązywania równań różniczkowych. Warszawa: PWN **1980**.
- [19] **Cottrell A.H.:** Własności mechaniczne materii. Warszawa: PWN **1970**.
- [20] **Crank J.:** The mathematics of diffusion. Oxford: Clarendon Press **1975**.
- [21] **Czernuszenko W., Rowiński P., Sukhodolov A.:** Experimental and numerical validation of the dead-zone model for longitudinal dispersion in rivers. J. Hydr. Res. **1998** nr 2.
- [22] **Czernuszenko W.:** Dyfuzja i dyspersja w rzekach. Arch. Hydrot. **1986** nr 3.
- [23] **Czernuszenko W.:** Naturalne mieszanie w rzekach. Arch. Hydrot. **1986** nr 1–2.
- [24] **Davies J.T.:** Turbulence phenomena. New York: Academic Press **1972**.
- [25] **Dera J.:** Fizyka morza. Warszawa: PWN **1983**.

- [26] **Dobbins W.E.:** BOD and oxygen relationships in streams. *Journal of Sanit. Eng. Div.* **1964** nr 90.
- [27] **Dobkowska Z., Pazdro K.M.:** *Szkolny poradnik chemiczny*. Warszawa: Wydawnictwa Szkolne i Pedagogiczne **1990**.
- [28] **Dresnack R., Dobbins W.E.:** Numerical analysis of BOD and DO profiles. *Journal of Sanit. Eng. Div.* **1968** nr 94.
- [29] **Druet Cz., Kowalik Z.:** *Dynamika morza*. Warszawa: PWN **1970**.
- [30] **Druet Cz.:** Ruch turbulentny cieczy w świetle równań hydrodynamiki. *Studia i Materiały Oceanologiczne* **1980** nr 29.
- [31] **Elder J.W.:** The dispersion of marked fluid in turbulent shear flow. *J. Hydr. Div.* **1959** nr 5.
- [32] **Elfeki A.M.M.:** Analysis and numerical simulation of a single-well tracer test. *J. Hydr. Res.* **2003** nr 1.
- [33] **Elsner J.N.:** *Turbulencja przepływów*. Warszawa: PWN **1987**.
- [34] **Elwell D., Pointon A.J.:** *Termodynamika klasyczna*. Warszawa: Wydawnictwa Naukowo-Techniczne **1976**.
- [35] **Fang H.W., Wang G.Q.:** Three-dimensional mathematical model of suspended-sediment transport. *J. Hydr. Eng.* **2000** nr 8.
- [36] **Felzenbaum A.U.:** *Teoreticzeskije osnovy i metody razczeta ustanowiwsichsia morskich tieczienij*. Moskwa: Izd AN SSSR **1960**.
- [37] **Fisher H.B. i in.:** *Mixing in inland and coastal waters*. New York: Academic Press **1979**.
- [38] **Fortuna Z., Macukow S., Wąsowski J.:** *Metody numeryczne*. Warszawa: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne **1982**.
- [39] **Franks F.:** *Woda*. Warszawa: Wydawnictwa Naukowo-Techniczne **1988**.
- [40] **Fried J.J.:** *Groundwater pollution*. Amsterdam: Academic Press **1975**.
- [41] **Gańczarczyk J.:** *Oczyszczanie ścieków metodą osadu czynnego*. Warszawa: Wydawnictwo Arkady **1969**.
- [42] **Geneja M.:** *Wpływ stężenia osadu czynnego w reaktorze nieprzepływowym na efektywność usuwania zanieczyszczeń organicznych ze ścieków*. Rozprawa doktorska. Gdańsk: Politechnika Gdańska **1992**.
- [43] **Godunow S.K.:** *Równania fizyki matematycznej*. Warszawa: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne **1975**.
- [44] **Górski A.:** *Chemia ogólna*. Warszawa: PWN **1965**.
- [45] **Gryboś R.:** *Podstawy mechaniki płynów*. Warszawa: PWN **1989**.
- [46] **Gurgul H.:** *Układy dyspersyjne w morzu*. Szczecin: Wydawnictwo US **1991**.
- [47] **Habermen W.L., Morton R.K.:** An experimental study of bubbles moving in liquid. *Proceedings of ASCE* **1954** nr 1.
- [48] **Hayashi T., Shuto N.:** Diffusion of warm water jet discharged horizontally at the water surface. *Proc. 12th Congress of IAHR*, Fort Collins: IAHR **1967**.
- [49] **Huang H., Fergen R.F., Proni J.R., Tsai J.J.:** Probabilistic analysis of ocean outfall mixing zones. *J. Env. Eng.* **1996** nr 5.
- [50] **Imhoff K., Imhoff K.R.:** *Kanalizacja miast i oczyszczanie ścieków – poradnik*. Warszawa: Wydawnictwo Arkady **1982**.
- [51] **James A.:** *Modelowanie matematyczne w oczyszczaniu ścieków i ochronie wód*. Warszawa: Wydawnictwo Arkady **1986**.
- [52] **Jankowski A.:** Pewne aspekty zastosowania schematu H–N do obliczeń cyrkulacji wiatrowej. *Studia i Materiały Oceanologiczne* **1976** nr 16.
- [53] **Janowski W.:** *Matematyka*. Warszawa: PWN **1967**.
- [54] **Jasińska E.:** Dyfuzory stosowane w celu wstępnego rozcieńczania ścieków zrzucanych do morza. *Inż. Morska* **1983** nr 2.
- [55] **Karaśkiewicz E.:** *Zarys teorii wektorów i tensorów*. Warszawa: PWN **1974**.

- [56] **Kazimierski Z.:** Numeryczne wyznaczanie trójwymiarowych przepływów turbulentnych. Wrocław: Ossolineum **1992**.
- [57] **Kącki E.:** Równania różniczkowe cząstkowe w zagadnieniach fizyki i techniki. Warszawa: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne **1992**.
- [58] **Kolmogorow A.N.:** Lokalna struktura turbulentności niezżimajemj żidkosti. Dokłady AN SSSR **1941** nr 4.
- [59] **Kowalewski M.:** A three-dimensional hydrodynamic model of the Gulf of Gdańsk. Oceanological Studies **1997** nr 4.
- [60] **Kowalik P.:** Ochrona środowiska glebowego. Warszawa: Wydawnictwo Naukowe PWN **2000**.
- [61] **Kowalik P.:** Optymalizacja systemów wodociągowo-kanalizacyjnych. Gdańsk: Wydawnictwo PG **1981**.
- [62] **Kraszewski A., Soncini-Sessa R.:** WODA. Milano: Ed. Clup **1984**.
- [63] **Kuś K.:** Modelowanie ruchu cząstek w strefie klarowania pulsatora. GWTS **1990** nr 2–3.
- [64] **Lauder B.E., Spalding D.B.:** Lectures in mathematical models of turbulence. New York: Academic Press **1972**.
- [65] **Law A.W.K.:** Taylor dispersion of contaminants due to surface waves. J. Hydr. Res. **2000** nr 1.
- [66] **Legras J.:** Praktyczne metody analizy numerycznej. Warszawa: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne **1974**.
- [67] **Leja F.:** Rachunek różniczkowy i całkowy. Warszawa: PWN **1973**.
- [68] **Libby P.A., Williams F.A.:** Turbulent reacting flows. Berlin: Springer Verlag **1980**.
- [69] **Łojcianskij L.G.:** Miechanika żidkosti i gaza. Moskwa: Izd. Nauka **1977**.
- [70] **Macioszyk T., Szestakow W.M.:** Dynamika wód podziemnych. Warszawa: Wydawnictwo Geologiczne **1983**.
- [71] **Mahmood K., Yevjevich V.:** Unsteady flow in open channel. Fort Collins: Water Res. Publ. **1975**.
- [72] **Mały kalendarz chemiczny:** Praca zbiorowa. Warszawa: Państwowe Wydawnictwo Techniczne **1958**.
- [73] **Mańczak H.:** Teoretyczne podstawy ochrony wód przed zanieczyszczeniem. Wrocław: Wydawnictwo PW **1973**.
- [74] **Marczuk G.I.:** Modele matematyczne w immunologii. Warszawa: PWN **1989**.
- [75] **Masbernat M. i in.:** Modele mathematique de la pollution. Toulouse: Institute Nationale Polytechnique de Toulouse **1972**.
- [76] **Metody obliczania rozcieńczenia ścieków wodami odbiornika. Wytyczne Techniczne Projektowania WTP–0.1.** Warszawa: Wydawnictwo Katalogów i Cenników **1973**.
- [77] **Michlin S.G., Smolicki C.L.:** Metody przybliżonego rozwiązywania równań różniczkowych i całkowych. Warszawa: PWN **1972**.
- [78] **Mikhailov M.D., Ozisik M.N.:** Unified analysis and solutions of heat and mass diffusion. New York: John Wiley and Sons **1984**.
- [79] **Millero F.J.:** The molal volumes of electrolytes. Chemical Reviews **1971** nr 2.
- [80] **Mitosek M.:** Mechanika płynów w inżynierii i ochronie środowiska. Warszawa: Wydawnictwo Naukowe PWN **2001**.
- [81] **Mizerski W.:** Tablice chemiczne. Warszawa: Wydawnictwo Adamanton **1997**.
- [82] **Modele matematyczne transportu i wymiany pędu i masy w wodach powierzchniowych i gruntowych.** Monografie KGW PAN **1991** nr 2.
- [83] **Monod J.:** Recherches sur la croissance des cultures bacteriennes. Paris: Hermann et Cie **1942**.
- [84] **Morrison F.:** Sztuka modelowania układów dynamicznych. Warszawa: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne **1996**.
- [85] **Nawalany M.:** Model transportu masy w wodach podziemnych w wyniku oddziaływania składowisk odpadów. Monografie KGW PAN **1991** nr 2.
- [86] **Nowacki W.:** Teoria niesymetrycznej sprężystości. Warszawa: PWN **1971**.
- [87] **O'Connor D.J.:** The temporal and spatial distribution of dissolved oxygen in streams. Water Resources Research **1967** nr 3.

- [88] **Orlob G.T.:** Eddy diffusion in homogeneous turbulence. *J. Hydr. Div.* **1959** nr 9.
- [89] **Orzechowski Z.:** Przepływy dwufazowe. Warszawa: PWN **1990**.
- [90] **Ościak J.:** Adsorpcja. Warszawa: PWN **1973**.
- [91] **Ozmidow R.W.:** Turbulencja oceaniczna. *Studia i Materiały Oceanologiczne* **1980** nr 29.
- [92] **Palarski J.:** Hydrotransport. Warszawa: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne **1982**.
- [93] **Papoulis A.:** Prawdopodobieństwo, zmienne losowe i procesy stochastyczne. Warszawa: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne **1972**.
- [94] **Parzonka W.:** Hydrauliczne podstawy transportu rurowego mieszanin dwufazowych. Wrocław: Wydawnictwo PW **1977**.
- [95] **Pazdro K.M.:** Podstawy chemii dla kandydatów na wyższe uczelnie. Warszawa: Wydawnictwo Edukacyjne **1991**.
- [96] **Piekarski M., Poniewski M.:** Dynamika i sterowanie procesami wymiany ciepła i masy. Warszawa: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne **1994**.
- [97] **Piotrowski I., Roman M.:** Urządzenia do oczyszczania wody i ścieków. Warszawa: PWN **1974**.
- [98] **Piwecki T., Biernacki M., Sawicki J.M.:** Model transportu masy w przepływach nieustalonych w rzekach i zbiornikach. Raport PR-07. Gdańsk: Politechnika Gdańska **1985**.
- [99] Podstawy biofizyki: Praca zbiorowa pod red. A. Piławskiego. Warszawa: PZWL **1985**.
- [100] **Prandtl L.:** Dynamika przepływów. Warszawa: PWN **1956**.
- [101] **Puzyrewski R., Sawicki J.M.:** Podstawy mechaniki płynów i hydrauliki. Wyd. III. Warszawa: Wydawnictwo Naukowe PWN **2000**.
- [102] **Rajar R., Cetina M.:** Modeling of tidal and wind-induced currents and dispersion in the Northern Adriatic. *Acta Adriatica* **1990** nr 32.
- [103] **Ralston A.:** Wstęp do analizy numerycznej. Warszawa: PWN **1983**.
- [104] **Rawn A.M., Bowerman F.R., Brooks N.H.:** Diffusers for disposal of sewage in sea water. *J. Sanit. Eng. Div.* **1960** nr 3.
- [105] **Rich L.G.:** Unit processes of sanitary engineering. New York: John Wiley and Sons **1963**.
- [106] **Richardson L.F.:** Atmospheric diffusion shown on a distance-neighbour graph. *Proc. Royal Soc. London* **1926** nr 1.
- [107] **Rietschel H., Raiss W.:** Ogrzewanie i klimatyzacja. Warszawa: Wydawnictwo Arkady **1972**.
- [108] **Romankow P.G., Raszkowski N.B., Frolow W.F.:** Procesy wymiany masy w technologii chemicznej. Warszawa: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne **1980**.
- [109] **Rowiński P., Czernuszenko W., Kozioł A.P., Kubrak J.:** Properties of a streamwise turbulent flow field in an open two-stage channel. *Arch. of Hydro-Eng. and Env. Mech.* **2002** nr 2.
- [110] **Rutherford J. C.:** River mixing. Chichester: John Wiley and Sons **1994**.
- [111] **Sawicki J.M., Hatim J.:** Dwuwymiarowy model skażeń wielkoobszarowych. *Inż. Morska* **1990** nr 5.
- [112] **Sawicki J.M., Hatim J.:** Porównanie metod opisu ruchu zawiesiny. *Zesz. Nauk. PG* **1990** nr 432.
- [113] **Sawicki J.M., Malus D.:** A velocity dependent coefficient of eddy viscosity. *Arch. of Hydro-Eng.* **1992** nr 3.
- [114] **Sawicki J.M., Pawłowska A.:** Energy balance for air lift pumps. *Arch. of Hydro-Eng. and Env. Mech.* **1999** nr 1-4.
- [115] **Sawicki J.M., Skuza M.K.:** Analiza usytuowania wylotu ścieków z GOŚ Dębogórze. *Mat. Konf. „Aktywizacja wybrzeża Zatoki Puckiej”*. Puck: Politechnika Gdańska **2001**.
- [116] **Sawicki J.M., Zima P.:** Badanie wpływu warunku brzegowego na rozwiązanie równania adwekcji-dyfuzji. *Mat. XV Szkoły Hydrauliki*. Wrocław: Wydawnictwo IBW PAN **1995**.
- [117] **Sawicki J.M., Zima P.:** The influence of mixed derivatives on the mathematical simulation of pollutants transfer. *Proc. 6th Conference of Water Pollution*. Southampton: Comp. Mech. Publ. **1997**.
- [118] **Sawicki J.M., Zima P.:** Wyznaczanie pola przepływu w zbiorniku otwartym przy pomocy równania biharmonicznego. *Mat. XIII Szkoły Hydrauliki*. Szczyrk: Politechnika Krakowska **1993**.

- [119] **Sawicki J.M.:** Analysis of spatial models of turbulence. Arch. Hydrot. **1989** nr 3–4.
- [120] **Sawicki J.M.:** Ewolucja pojęcia izotropia w naukach geofizycznych. Przegląd Geofizyczny **1988** nr 3.
- [121] **Sawicki J.M.:** Hydraulic analysis of linear dewatering systems. J. Irrig. and Drainage Eng. **1996** nr 6.
- [122] **Sawicki J.M.:** Hydrauliczne projektowanie reaktorów do oczyszczania wody i ścieków. Mat. Konf. Techn. „Oczyszczanie wód”. Sopot: BPI Egeria **2002**.
- [123] **Sawicki J.M.:** Influence of electrostriction on state and continuity equations. Arch. of Hydro-Eng and Env. Mech. **1999** nr 1–4.
- [124] **Sawicki J.M.:** Konwekcyjny model turbulencji przyściennej. Zesz. Nauk. PG **1989** nr 30.
- [125] **Sawicki J.M.:** Mass and momentum dispersion in open reservoirs. Proc. Int. Symp. „Hydrology of Natural and Manmade Lakes”. Wiedeń: IAHS **1991**.
- [126] **Sawicki J.M.:** Matematyczne modele turbulencji. Gdańsk: Wydawnictwo PG **1986**.
- [127] **Sawicki J.M.:** Niesymetryczny model turbulencji. Inżynieria Morska i Geotechnika **1996** nr 1.
- [128] **Sawicki J.M.:** Numeryczny model jednowymiarowej dyspersji hydrodynamicznej. Gosp. Wodna **1989** nr 4.
- [129] **Sawicki J.M.:** O normalizacji metod prognozowania transportu zanieczyszczeń. GWTS **1992** nr 8.
- [130] **Sawicki J.M.:** One-dimensional macro-dispersion in confined aquifers. Proc. XXVth Congress of IAHR. London: IAHR **1995**.
- [131] **Sawicki J.M.:** Plane dispersion of pollutants. W: „Hydrological, Chemical and Biological Processes of Transformation and Transport of Contaminants in Aquatic Environment”. IAHS Publications **1994** nr 219.
- [132] **Sawicki J.M.:** Praktyczny model dyspersji podłużnej. Mat. VII Krajowej Konf. Mechaniki Płynów. Rydzyna: Politechnika Łódzka **1986**.
- [133] **Sawicki J.M.:** Próba określenia zależności między współczynnikiem turbulentnej dyfuzji a parametrami przepływu wody w rzece. Arch. Hydrot. **1976** nr 1.
- [134] **Sawicki J.M.:** Przepływy ze swobodną powierzchnią. Warszawa: Wydawnictwo Naukowe PWN **1998**.
- [135] **Sawicki J.M.:** Przybliżone rozwiązanie zadania stacjonarnego opływu walca kołowego. Arch. Hydrot. **1984** nr 1–2.
- [136] **Sawicki J.M.:** Simplified modelling of heat transfer in groundwater. Arch. of Hydro-Eng. and Env. Mech. **2001** nr 4.
- [137] **Sawicki J.M.:** Turbulent flow around a cylinder. Arch. Hydr. **1990** nr 3–4.
- [138] **Sawicki J.M.:** Uwagi o procesach przenoszenia w przepływach ze swobodną powierzchnią. Mat. IX Szkoły Hydrauliki. Kraków: Politechnika Krakowska **1991**.
- [139] **Sawicki J.M.:** Wpływ burzliwości na proces sedymentacji w osadnikach. Inż. Morska i Geotechnika **1981** nr 6.
- [140] **Sawicki J.M.:** Wymiarowanie piaskowników napowietrzanych. GWTS **1980** nr 6.
- [141] **Schiller E.J., Sayre W.N.:** Vertical temperature profiles in open-channel flow. Annales Soc. Civ. Eng. **1975** nr 101.
- [142] **Schmidt W.:** Der Massenaustausch in Freir Luft und Vrtwandte Erscheinungen. Probleme der Kosmischen Physik **1925** nr 7.
- [143] **Schnelle K.B., Thackston E.L., Krenkel P.A.:** Mathematical modelling of dispersion in rivers. Proc. 12th Congress of IAHR. Fort Collins: IAHR **1967**.
- [144] **Silin W.P.:** Wstęp do teorii kinetycznej gazów. Warszawa: PWN **1975**.
- [145] **Sineltchikov V.S.:** About turbulent diffusion of suspended particles in fluid flow. Proc. 12th Congress of IAHR. Fort Collins: IAHR **1967**.
- [146] **Slattery J.C.:** Advanced transport phenomena. Cambridge: University Press **1999**.
- [147] **Smirnow W.L.:** Matematyka wyższa. Warszawa: PWN **1962**.
- [148] **Smoluchowski M.:** Zarys kinetycznej teorii ruchów Browna i roztworów mętnych. Rozprawy Wyzd. Matematyczno-Przyrodniczego AU w Krakowie **1906** nr XVI.

- [149] **Soo L.:** Fluid dynamics of multiphase systems. London: Blaisdell Publ. Comp. **1966**.
- [150] **Staniszewski B.:** Termodynamika. Warszawa: PWN **1982**.
- [151] **Stoer J.:** Wstęp do metod numerycznych. Warszawa: PWN **1979**.
- [152] **Streeter H.W., Phelps E.B.:** A study of the pollution and natural purification of the Ohio River. Bull. U.S. Public Health Service **1925** nr 146.
- [153] **Suchecki W.:** Analiza sił działających na cząstkę stałą, zawieszoną w pulsującym strumieniu cieczy. Mat. VIII Konf. Nauk. MOPS. Białystok: Politechnika Białostocka **1998**.
- [154] **Suchecki W.:** Metoda analizy ruchu cząstki stałej w pulsacyjnym strumieniu lepkiej cieczy. Prace Naukowe PW – Mechanika **1999** nr 176.
- [155] **Suschka J., Zieliński J., Glajcar E.:** Urządzenia do natleniania ścieków. Warszawa: Wydawnictwo Arkady **1979**.
- [156] **Szymkiewicz R.:** Hydrologia. Gdańsk: Wydawnictwo PG **1990**.
- [157] **Szymkiewicz R.:** Modelowanie matematyczne przepływów w rzekach i kanałach. Warszawa: Wydawnictwo Naukowe PWN **2000**.
- [158] **Szymkiewicz R.:** Przeniesienie masy w warunkach nieustalonego przepływu ze swobodnym zwierciadłem – metoda identyfikacji parametrów. Arch. Hydrot. **1983** nr 3.
- [159] Tablice matematyczne, fizyczne, chemiczne i astronomiczne: Praca zbiorowa. Warszawa: Wydawnictwa Szkolne i Pedagogiczne **1984**.
- [160] **Taylor G.I.:** Diffusion by continuous movements. Proc. London Math. Soc. **1921** nr 20.
- [161] **Taylor G.I.:** Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube. Proc. Royal Soc. London **1953** nr 219.
- [162] **Taylor G.I.:** The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe. Proc. Royal Soc. London **1954** nr 223.
- [163] **Tennekes H., Lumley J.T.:** A first course in turbulence. Cambridge: MIT Press **1972**.
- [164] Turbulence modeling of surface water flow and transport. The ASCE Task Committee. J. Hydr. Eng. **1988** nr 9.
- [165] **Urbaniec K.:** Optymalizacja w projektowaniu aparatury procesowej. Warszawa: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne **1979**.
- [166] **Van Driest E.M.:** On turbulence flow near a wall. J. Aero. Sc. **1956** nr 10.
- [167] **Verruijt A.:** Theory of groundwater flow. Delft: Macmillan and Co. **1970**.
- [168] **Volk W.:** Statystyka stosowana dla inżynierów. Warszawa: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne **1973**.
- [169] **Walden H., Stasiak J.:** Mechanika cieczy i gazów w inżynierii sanitarnej. Warszawa: Wydawnictwo Arkady **1971**.
- [170] **Wang C.C.:** A new representation theorem for isotropic functions. Archive for Rational Mechanics and Analysis **1970** nr 3.
- [171] **Wang L.K., Vielkind D., Wang M.H.:** Mathematical models of dissolved oxygen concentration in fresh water. Ecological Modelling **1978** nr 5.
- [172] **Więckowski J.:** Wstęp do mechaniki ośrodków ciągłych. Gdańsk: Wydawnictwo PG **1980**.
- [173] Wodociągi i kanalizacja – poradnik: Praca zbiorowa pod red. M. Romana. Warszawa: Wydawnictwo Arkady **1991**.
- [174] Wodociągi i kanalizacja – poradnik: Praca zbiorowa. Warszawa: Wydawnictwo Arkady **1971**.
- [175] Wyloty kanalizacyjne służące do wprowadzania ścieków do wód powierzchniowych. Wytyczne Techniczne Projektowania WTP–0.7. Warszawa: Wydawnictwo Katalogów i Cenników **1973**.
- [176] Zbiór wielkości fizykochemicznych: Praca zbiorowa. Warszawa: PWN **1974**.
- [177] **Zeidler R.:** Struktura i metody predykcji procesów turbulentnej dyfuzji. Studia i Materiały Oceanologiczne **1975** nr 12.
- [178] **Zierep J.:** Kryteria podobieństwa i zasady modelowania w mechanice płynów. Warszawa: PWN **1978**.
- [179] **Zima P.:** Approximated boundary conditions of the equation of diffusion. Arch. of Hydro-Eng. and Env. Mech. **2002** nr 2.

SKOROWIDZ NAZWISK

Alembert J.R. de 282
Anderson E. 175
Arrhenius S.A. 73
Avogadro di Quaregna A. 20

Basset A.B. 288
Bernoulli D. 56, 283
Bidone G. 98
Boltzmann L.E. 22, 125
Boussinesq V.J. 162
Brown S.N. 63
Buckingham E. 166

Camp T.R. 263
Cauchy A.L. 145, 298
Celsjusz A. 93
Chezy A.L. 174, 218
Churchill W.S. 103
Coriolis G.G. 180, 242
Cosserat E. 51
Cosserat F. 51
Couette M. 68
Courant R. 147, 192

Dalton J. 34
Darcy H.P.G. 238, 244
Davis J.K. 73
Dirac P.A.M. 133
Dirichlet P.G.I. 117, 120, 140, 146, 227
Dobbins W.E. 103, 263
Driest E. van 164
Dufour K. 64
Duhamel J.M.C. 288

Einstein A. 63, 74, 180
Elder J.W. 234
Escudier B. 164
Euklides 30

Euler L. 29, 38, 283

Fick A. 59, 63, 90
Fisher H.B. 223, 230
Fourier J.M. 64, 91, 131, 183
Frankel R.J. 263
Freundlich H. 109
Froude W. 203, 270

Gauss C.F. 43, 52, 168, 237
Gibbs J.W. 103
Gloyna P. 224

Hankel H. 117, 124
Hansen W.D. 263
Henry J. 27
Herning F. 72
Hoff J.H. van't 93, 99, 105
Holland J.P. 198

Jain S.C. 224

Kammerlingh-Onnes H. 76
Karman Th. von 164
Keefe T.N. 224
Kelvin (patrz Thomson)
Kessener J.H.N. 101
Kolmogorow A.N. 165, 175
Knudsen M.H.Ch. 24, 36

Lagrange J.L. 29, 38, 169, 175, 282
Langmuir I. 109
Laplace P.S. 169, 282
Lin S. 224
Lipschitz S. 297

Magnus H.G. 290
Manning R. 56, 174, 227, 269

- Maxwell J. 22
McQuivey R.S. 224
Monod J. 107
Munk W. 175
- Navier L.M.N. 85
Neumann E.P. 117, 227
Newton I. 49, 67, 125, 162, 280
Nikuradse J. 165
Nusselt E.K.W. 251
- O'Connor D.J. 103, 263
Officer C.B. 175
Oseen C.W. 289
Ostrogradski M.W. 43, 52
Owens M. 103
- Parker S. 224
Pasquill F. 271
Patterson R.W. 224
Peclet J.C. 123, 156
Phelps E.B. 96, 135, 256
Picard C.E. 297
Prandtl L. 156, 159, 162
- Reynolds O. 152, 159, 165
Richards L.A. 240
- Richardson L.F. 175, 177
Ritz W. 145
Rodger J.W. 71
Ruffel M.P. 270
- Saint-Venant B. de 232, 234
Sayre W.W. 175, 231
Schiller E.J. 175
Schmidt E. 146
Schmidt B. 99, 152, 170
Smoluchowski M. 63
Stefan J. 125
Stokes G.G. 85, 285
Streeter H.W. 96, 135
Strouhal V. 123, 152
Sutherland W. 66, 71
- Taylor G.I. 65, 160, 176, 180, 218
Thackston L. 224
Thomson W. (Kelvin) 71, 93
Thorpe T.E. 71
- Waals J.D. van der 76
Wilke C.R. 72
- Zipperer L. 72

SKOROWIDZ RZECZY

- adsorpcja 109, 245, 251
- aerator 101
- anizotropia 60, 171, 230, 239
- autonomiczne obszary wirowe 160

- bazowe wielkości fizyczne 31, 83, 275
- bazowy układ równań 31, 40, 82
- bilans entropii 40
- biochemiczne zapotrzebowanie tlenu (BZT) 103, 257
- brzeg obszaru 112, 114
- burzliwe przewodzenie ciepła 182

- całka Duhamela 288
- całkowity węgiel organiczny (TOC) 103
- charakterystyka 131, 256
- ciepło właściwe 74, 315
- ciśnienie 34, 68, 276
- czas przebiegu reakcji 92
 - retardacji 115
 - uśredniania 159
 - zatrzymania płynu 92
 - życia osiadłego 23
- cząstki charakterystyczne 31, 39, 273, 279
- cząstkowa objętość właściwa 77, 316
- cyklon 47

- deficyt substancji rozpuszczonej 95, 98
- diada 47, 159
- domieszka 16
- drgania samowzbudne 158
- droga mieszania 161
 - przeskoku 23
- drugie prawo Newtona 70, 280
- dyfuzja burzliwa 167
 - molekularna 33, 59
 - numeryczna 191

- dyfuzyjna liczba Couranta 147
- dyskretyzacja 146
- dyspersja energii 41, 150, 166
 - hydrodynamiczna (w ośrodku porowatym) 150, 236
 - masy 41, 150, 208, 211, 228, 240, 264
- dysypacja energii 56
- dystans przecięcia brzegu 199

- efekt Dufoura 64
 - Magnusa 290
- elektrofiltr 47
- elektrostrykcja 77, 81
- energia cieplna 26
- eutrofizacja 106

- faza 24, 25
- flotacja 25, 107, 303
- fluacja 243
- fotosynteza 105
- formułowanie zagadnienia 112
- funkcja autokorelacyjna Laplace'a 169
 - błędu 143
 - Diraca 133
 - Monoda 107
 - rozkładu 32
- funkcje źródłowe 28, 42, 92, 110, 256

- gęstość rozkładu 30, 47
 - substancji 34, 84, 276, 278
- hipoteza Boussinesq-Prandtla 162, 221
 - Newtona 162, 281

- inhibitor 94
- intensywność dysypacji energii 176
 - impulsu 133
- intermittencja 157

- izotermy procesu adsorpcji 109
izotropia 60, 162, 173, 177, 239
- jednorodność 24
- katalizator 94
kinetyczna energia turbulencji 162
kinetyka reakcji 93
klasy jakości wody 258
koalescencja 28
koncentracja 35
kontrakcja 77, 81
konwekcja 76, 125
krętość 243
krzywa Gaussa 168, 222, 237
- lepkość burzliwa 160
– molekularna 68
liczba Avogadra 20
– Couranta 147, 192
– Froude’a 203, 270
– Knudsena 24
– Nusselta 251
– Pecleta 123, 138, 156, 244
– Prandtla 156
– Reynoldsa 152, 157, 176, 220, 244, 288
– Richardsona 175, 203
– Schmidta 99, 152, 170, 220
– Strouhala 123, 152
- makrodyspersja w gruncie 248, 264
makroskopowy zbiór molekuł 20
martwa strefa 266
masa stowarzyszona 284
metoda analizy wymiarowej 290
– elementów skończonych 146
– Eulera 29
– fenomenologiczna 37, 107, 310
– Fouriera 131
– Lagrange’a 29
– odbić zwierciadlanych 188
– Pasquilla 271
– różnic skończonych 146
– Ruffela 270
– Schmidta (graficzna) 146
– strukturalna 38, 107, 273, 303
– uciekającego brzegu 121, 227
- mieszanina 25
mikrostruktura momentowa 51
mineralizacja substancji organicznych 103
model biharmoniczny 301
– stratyfikowany 127, 267
– Streetera-Phelpsa 135, 139, 150, 255, 269
modele turbulencji 160
moduł sprężystości 79
- napężenie 67
– normalne 34
– styczne 34
– turbulentne 159
natlenianie wody 97
nitryfikacja 106
- objętość kontrolna 41
– obserwacyjna 41
– płynna 41
obszar wpływu 115
obumieranie komórek 107
ocena oddziaływania na środowisko 18
odskok Bidone’a 98
okres uśredniania 159
osie główne 171, 230
- paradoks d’Alemberta 282
parametr Coriolisa 180
płynność 23
pochodna substancjalna 256
podstrefa adwekcyjna 222
pole bliskie 198, 213
– dalekie 198, 214
porowatość 239, 277
postulat obiektywności 59
– przyczynowości 59
potencjał filtracyjny 240
– prędkości 282
powierzchnia cząstki 277
– czynna 277
– rozdziału 127
- prawo Daltona 34
– Darcy’ego 239, 244
– Ficka 59, 75, 90, 121, 168, 179, 22, 230, 241, 275
– Fouriera 64, 75, 91, 12, 183
– Henry’ego 27
– konstytutywne 58
– Newtona 67, 75, 125, 251
– Stefana-Boltzmana 125
– zachowania energii
– – masy
– – momentu pędu
– – pędu
prędkość 32, 86

- adwekcji 33, 275
- barycentryczna 33, 63, 275
- dynamiczna 174
- filtracji 238
- mieszaniny 32
- porowa 239
- swobodnego opadania cząstki 278, 303
- względna 90, 275
- procesy jednostkowe 96
- produkty reakcji 92
- promień wodzący 280
- przebiecie hydrauliczne 267
- przejmowanie ciepła 125
 - masy 126, 265
- przepływ Couette'a 68
- przestrzeń afiniczna 30
 - metryczna 30
- przybliżenie dyfuzyjne 85

- reakcja pierwszego rzędu 94, 107
- reaktor 93, 142, 200
- reguła van't Hoffa 93, 99, 105
- rozcieńczenie 35
- rozkład Maxwella-Boltzmana 22
- rozpuszczalność 26
- rozszerzalność ciepła 78
- roztwór 25, 87
- równanie adwekcji-dyfuzji 91, 141
 - kaloryczne 74
 - konstytutywne 58, 67, 162
 - Naviera-Stokesa 85
 - nieustalonej adwekcji 131
 - przewodnictwa cieplnego 91
 - Reynoldsa 159
 - Richardsa 240
 - Saint-Venanta 232, 260
 - stanu 34, 40, 76, 79, 83
 - gazu doskonałego 76
 - Kammerlingha-Onnesa 76
 - van der Waalsa 76
 - zachowania energii 51, 83
 - masy 41, 83, 88
 - momentu pędu 50
 - pędu 46, 49, 83
- ruch turbulentny 157
- ruchy Browna 63, 180, 276, 304
- rząd reakcji 94

- samodyfuzja 61, 81
- samooczyszczanie wód 97, 103, 199, 259
- sedymентация 26, 107, 303

- selektywne ujęcie wody 234
- siatka Davisa 73
- siła Archimedesowa 290
 - Basseta 288
 - ciężkości 47, 281
 - Coriolisa 242
 - Newtona 290
 - odśrodkowa 47, 281
 - oporu 277
 - Saffmana 290
 - Stokesa 285, 288
- siły elektrostatyczne 47, 281
- skala czasowa Lagrange'a 169, 199
 - liniowa Lagrange'a 175, 180
 - – Kołmogorowa 176
 - – Taylora 176
 - wielkości fizycznej 150, 155
- skośność 222
- spadek hydrauliczny 177, 218
- stała gazowa 74
 - szybkości mineralizacji 103
 - – natleniania wody 99
 - – nityfikacji 106
 - – syntezy biomasy 107
- stany skupienia materii 21, 26
- stężenie 35, 276, 313
 - nasycenia 27
- strata energii mechanicznej 56, 62
- strefa dyfuzji 198, 213
 - dyspersji 198
 - mieszania 111, 197, 199
 - strumienia 197, 213
- struktury koherentne 161
- strumień jednostkowy energii 64, 183, 218
 - – masy 44, 59, 167, 218, 229, 241, 249
- substancja rozkładalna 42
 - trwała 42
- substraty 92
- systemy napowietrzające 100
- szczotka Kessenera 101
- szereg Taylora 65, 160

- ściśliwość 79
- średnia droga swobodna molekuly 22, 61
 - prędkość kwadratowa 22
- średnica równoważna cząstki 279

- temperatura 22, 36, 276
- tensor naprężenia 33, 47, 281
 - naprężeń turbulentnych 159
 - prędkości deformacji 68

- teoria kontynualna 20
- termodyfuzja 64
- tło 81, 115, 119
- tor cząstki 38
- trajektoria cząstki 38
- turbulencja 157
- twierdzenie Buckinghama 166
 - Gaussa-Ostrogradskiego 43, 48, 51
- twierdzenia o reprezentacji funkcji 231
- typy równań różniczkowych 116

- układ fizyczny 112
 - jednofazowy 24
 - prosty 24
 - rozproszony 24
 - wielofazowy 24
 - złożony 24
- uśrednianie prędkości 158
- uzupełniająca funkcja błędu 143

- wariancja 168
- warunek jednorodności wymiarowej 59
 - kinematyczny na powierzchni 217
- warunki brzegowe 97, 12, 116, 294
 - – Dirichleta 117, 120, 295
 - – Hankela 117, 124, 295
 - – mieszane 117, 126, 295
 - – Neumanna 117, 12, 295
- początkowe 112, 115, 294
- zgodności 127, 266
- wielkości bezwymiarowe 30
 - ekstensywne 30
 - fizyczne 29
 - intensywne 30
 - skalarne 86, 184
 - wymiarowe 30
- wilgotność 278
- współczynnik dyfuzji burzliwej 169
 - – molekularnej 60, 314
 - – zawiesiny 63
 - dyspersji hydrodynamicznej 241, 243
 - – podłużnej 220, 230
 - – poprzecznej 223, 230
 - filtracji 239
 - lepkości burzliwej 162
 - – molekularnej 68, 315
 - makrodyspersji 249
 - Manninga 269
 - oporu 291, 317
 - przejmowania ciepła 125
 - – masy 126
 - przewodzenia ciepła 64, 184
 - rozszerzalności cieplnej 78
 - samodyfuzji 61
 - straty energii 165
 - temperatury 93
 - wirialu 76
 - wyrównywania temperatury 83, 183
- wykładnik meteorologiczny 271, 317
- wylot kanalizacyjny 204, 270
- wymiar cząstki 278
- wysokość wyniesienia 198
- wzór Arrheniusa 73
 - Einsteina 74
 - Hollanda 198
 - Prandtla-Kołmogorowa 165
 - Sutherlanda 66, 71

- zanieczyszczenie 16, 26
- zasada zanikającej pamięci 59, 115
- zawiesina 25
 - koloidalna 25, 273
 - makroskopowa 25, 273
- zbiornik nieprzepływowy 103
 - o idealnym mieszaniu 119, 264
- zdolność natleniania (OC) 100
- zmienne konstytutywne 59

- źródło punktowe 110, 259

WYDAWNICTWO POLITECHNIKI GDAŃSKIEJ

Wydanie II. Ark. wyd. 18,2. Ark. druku 20,25, 59/480

Druk: Przedsiębiorstwo Prywatne *WiB* Piotr Winczewski
ul. Sobieskiego 14, 80-216 Gdańsk, tel. 058 341 99 89