

Μεταφορά διαλυμένου ρύπου σε
κορεσμένο έδαφος:
Μαθηματική περιγραφή

Βασικό ερώτημα:
Πού θα πάει ο ρύπος;

Παρουσίαση 1 από 4
Μεταφορά λόγω διάχυσης

Ως τώρα έχουμε συζητήσει ποιοτικά τρεις μηχανισμούς μεταφοράς

- **Μεταγωγή**: κίνηση με τη μέση ταχύτητα του νερού (ή του αέρα) – πιο σημαντική στα περατά εδάφη
 - **Ταχύτητα υπόγειου νερού** σε περατά εδάφη (άμμοι-χαλίκια): **10-100 m τον χρόνο**ⁱ
- **Διασπορά**: περαιτέρω εξάπλωση λόγω αποκλίσεων από τη μέση ταχύτητα
- **Διάχυση**: εξάπλωση λόγω της τυχαίας κίνησης των μορίων

ⁱ Mackay, D.M., P.V. Roberts and J.A. Cherry, 1985, Transport of organic contaminants in groundwater, Environmental Science & Technology, 19:5:384-392.

Κύριος στόχος παρουσίασης

- Γιατί ασχολούμαστε εδώ με τη διάχυση μόνον;
 - για διδακτικούς σκοπούς κυρίως
- Για τις **μερικές διαφορικές εξισώσεις** που περιγράφουν τη μεταφορά ρύπου που είναι διαλυμένος στην υδατική φάση κορεσμένου εδάφους, στόχος είναι να καταλάβουμε:
 - **πώς προκύπτουν;** - ισοζύγιο μάζας ρύπου
 - **τι εκφράζουν;** - με ποιον όρο/ποια παράμετρο περιγράφεται ο κάθε μηχανισμός που συμβάλλει στη μεταφορά;

Τέσσερα μεγέθη που αποτιμούν σοβαρότητα ρύπανσης

- Συγκέντρωση ρύπου σε εδαφικό δείγμα (στην Περιβαλλοντική Γεωτεχνική, σπανίως έχουμε χημικές αναλύσεις από εδαφικά δείγματα σε κορεσμένο έδαφος)

$C_{A\text{έδαφος}}$ = συνολική μάζα ρύπου A / μάζα ξηρού εδάφους

- Συνολική μάζα ρύπου στη ρυττασμένη περιοχή
- Συγκέντρωση ρύπου στο υπόγειο νερό

NEW!

C_{Aw} = μάζα διαλυμένου ρύπου A / όγκος νερού πόρων

- Ροή μάζας ρύπου

J = Μάζα διαλυμένου ρύπου A / (χρόνος × επιφάνεια*)

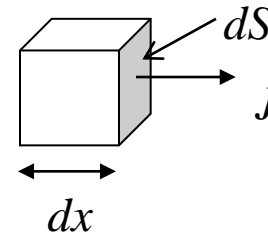
* \perp ροή

Ροή μάζας λόγω διάχυσης, διάλυμα

1^{ος} Νόμος του Fick (εμπειρικός)

Μάζα που διαχέεται* ανά επιφάνεια, χρόνο

$$J = -D_{\delta} \frac{\partial C}{\partial x}$$

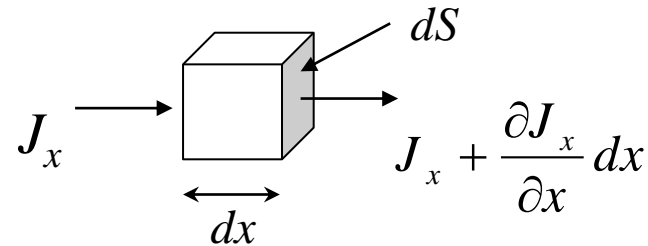


- J = ροή μάζας [$M/L^2 T$]
- C = συγκέντρωση διαλυμένης ουσίας (ρύπου) [M/L^3]
- D_{δ} = συντελεστής διάχυσης (σε υδατικό διάλυμα) [L^2/T]
ασφαλής εκτίμηση: $10^{-9} m^2/s$

* Σχόλιο ορολογίας: εδώ απολύτως σωστό αφού ο μόνος μηχανισμός της μεταφοράς είναι η διάχυση

Εξίσωση μεταφοράς λόγω διάχυσης, διάλυμα (1D)

- Ισοζύγιο μάζας στον όγκο αναφοράς (διάλυμα)



Διαφορά μάζας στον όγκο αναφοράς $dx dS$ σε χρόνο dt = Εισερχόμενη ροή μάζας μέσω επιφάνειας dS

- Εξερχόμενη ροή μάζας μέσω επιφάνειας dS

$$\frac{\partial C}{\partial t} [dx \cdot dS]$$

$$= J_x dS - \left(J_x + \frac{\partial J_x}{\partial x} dx \right) dS = - \frac{\partial J_x}{\partial x} dx dS$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_\delta \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

2^{ος} νόμος Fick

$$J = -D_\delta \frac{\partial C}{\partial x}$$

1^{ος} νόμος Fick

Εξίσωση μεταφοράς λόγω διάχυσης, έδαφος χωρίς ρόφηση (1D)

1^{ος} Νόμος Fick (έδαφος): $J = -D_e n \frac{\partial C}{\partial x}$

Σχόλια για την εμφάνιση & τις τιμές των παραμέτρων

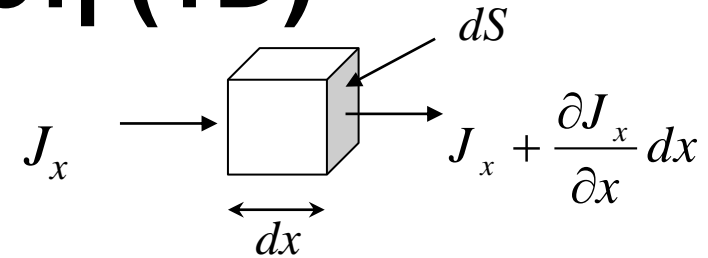
- πορώδες, n : ροή μάζας μέσω απομειωμένης επιφάνειας
- ενεργός συντελεστής διάχυσης, $D_e < D_\delta$: διάχυση δυσκολότερη σε νερό των πόρων σε σχέση με διάλυμα
- $D_e = D_\delta \omega$, $\omega = 0.01 - 0.5$
άμμοι έως και: $\omega=0.7$

2^{ος} Νόμος Fick (έδαφος, χωρίς ρόφηση)

Διαφορά διαλύματος-εδάφους: στο έδαφος, το ισοζύγιο μάζας εκφράζεται θεωρώντας διαφορά μάζας ρύπου σε όγκο αναφοράς $n dx dS$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_e \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

Εξίσωση μεταφοράς λόγω διάχυσης, έδαφος με ρόφηση (1D)



Ισοζύγιο μάζας με ρόφηση

Διαφορά **διαλυμένης** μάζας + Διαφορά μάζας = Εισερχόμενη - Εξερχόμενη
 στον όγκο διαλύματος **ροφημένης** ροή μάζας ροή μάζας
 (του όγκου αναφοράς) **στη μάζα έδαφους** μέσω dS μέσω dS
 $= n \, dx \, dS$ (του όγκου αναφοράς) $= \rho_d \, dx \, dS$ σε χρόνο dt

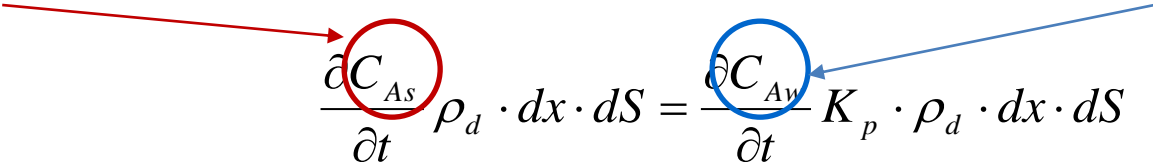
$$\frac{\partial C_{Aw}}{\partial t} n dx dS + \frac{\partial C_{As}}{\partial t} \rho_d dx dS = - \frac{\partial J_x}{\partial x} dx dS$$

- Διαφορά ροφημένης μάζας

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} \rho_d \cdot dx \cdot dS = \frac{\partial C_{Aw}}{\partial t} K_p \cdot \rho_d \cdot dx \cdot dS$$

Εξίσωση μεταφοράς λόγω διάχυσης, έδαφος με ρόφηση (1D) – ΠΑΥΣΗ!

Ποια κεφαλαιώδης παραδοχή είναι «κρυμμένη» στην αντικατάσταση του όρου με τη συγκέντρωση του ροφημένου ρύπου από τον όρο με τη συγκέντρωση του διαλυμένου ρύπου;


$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} \rho_d \cdot dx \cdot dS = \frac{\partial C_{Av}}{\partial t} K_p \cdot \rho_d \cdot dx \cdot dS$$

Η ισορροπία μεταξύ υδατικής φάσης και στερεάς φάσης επέρχεται στιγμιαία.

Αλήθεια;

Βεβαίως και όχι.

Τότε γιατί το κάνω;

Για να έχω μία μόνο μεταβλητή.

Σημείωση: θα δούμε σε επόμενες παρουσιάσεις (α) εναλλακτική (πιο περίπλοκη) προσέγγιση και (β) επιπτώσεις αυτής της παραδοχής (δηλ. διαφορά παρατηρήσεων – προβλέψεων)

Εξίσωση μεταφοράς λόγω διάχυσης, έδαφος με ρόφηση (1D), συν.

Ισοζύγιο μάζας με ρόφηση

$$\frac{\partial C}{\partial t} n dx \cdot dS + \frac{\partial C}{\partial t} K_p \cdot \rho_d \cdot dx \cdot dS = n D_e \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dx \cdot dS$$

2^{ος} νόμος Fick με ρόφηση

$$\frac{\partial C}{\partial t} \left(1 + \frac{K_p \cdot \rho_d}{n} \right) = D_e \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

- Συντελεστής υστέρησης, $R = 1 + \frac{K_p \cdot \rho_d}{n}$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_e^* \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad D_e^* = \frac{D_e}{R}$$

Η ρόφηση απομειώνει τον συντελεστή διάχυσης & καθυστερεί την εξάπλωση του ρύπου

Λύση της εξίσωσης μεταφοράς λόγω διάχυσης (1D)

- για αρχικά καθαρό πεδίο παντού πλην της πηγής: $C = 0$
 $x > 0, t = 0$
- για πηγή σταθερής συγκέντρωσης C_o που επιβάλλεται στον χρόνο $t = 0$

$$C(x, t) = C_o \cdot \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$$

- $D = D_e, D_e^*$, ανάλογα με την περίπτωση
- erfc = συμπληρωματική συνάρτηση σφάλματος (από πίνακα ή EXCEL)

- erf = συνάρτηση σφάλματος $\operatorname{erf}(a) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^a e^{-\varepsilon^2} d\varepsilon$

$$\operatorname{erfc}(a) = 1 - \operatorname{erf}(a) \quad \operatorname{erf}(-a) = -\operatorname{erf}(a)$$

$$\operatorname{erfc}(-a) = 1 - \operatorname{erf}(-a) = 1 + \operatorname{erf}(a) = 1 + 1 - \operatorname{erfc}(a) = 2 - \operatorname{erfc}(a)$$

Τιμές της συνάρτησης σφάλματος

α	$erf(\alpha)$	$erfc(\alpha)$	α	$erf(\alpha)$	$erfc(\alpha)$
0	0	1.0	1.1	0.880205	0.119795
0.05	0.056372	0.943628	1.2	0.910314	0.089686
0.1	0.112463	0.887537	1.3	0.934008	0.065992
0.15	0.167996	0.832004	1.4	0.952285	0.047715
0.2	0.222703	0.777297	1.5	0.966105	0.033895
0.25	0.276326	0.723674	1.6	0.976348	0.023652
0.3	0.328627	0.671373	1.7	0.983790	0.016210
0.35	0.379382	0.620618	1.8	0.989091	0.010909
0.4	0.428392	0.571608	1.9	0.992790	0.007210
0.45	0.475482	0.524518	2.0	0.995322	0.004678
0.5	0.520500	0.479500	2.1	0.997021	0.002979
0.55	0.563323	0.436677	2.2	0.998137	0.001863
0.6	0.603856	0.396144	2.3	0.998857	0.001143
0.65	0.642029	0.357971	2.4	0.999311	0.000689
0.7	0.677801	0.322199	2.5	0.999593	0.000407
0.75	0.711156	0.288844	2.6	0.999764	0.000236
0.8	0.742101	0.257899	2.7	0.999866	0.000134
0.85	0.770668	0.229332	2.8	0.999925	0.000075
0.9	0.796908	0.203092	2.9	0.999959	0.000041
0.95	0.820891	0.179109	3.0	0.999978	0.000022
1.0	0.842701	0.157299			

Ερώτηση κατανόησης (του φαινομένου της διάχυσης)

- Για τις ίδιες συνοριακές συνθήκες, η λύση της εξίσωσης μεταφοράς λόγω διάχυσης της προηγούμενης διαφάνειας περιγράφει την εξάπλωση ρύπου (σε 1D):
 - στον αέρα* της ακόρεστης ζώνης
 - σε κορεσμένο έδαφος
- Σε ποιο μέσο περιμένετε η εξάπλωση του ρύπου να είναι πιο γρήγορη; Γιατί;

$$C(x,t) = C_o \cdot \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$$

*ακριβής λύση για ξηρή ακόρεστη ζώνη – ποια η διαφορά όταν $S_w > 0$;

Παράδειγμα: εξάπλωση ρύπου λόγω διάχυσης σε διάλυμα και σε έδαφος

- Έστω πηγή σταθερής συγκέντρωσης C_o . Πού θα βρίσκεται ο ρύπος σε 100 χρόνια σε διάλυμα (D_δ) και σε έδαφος χωρίς (D_e) - με (D_e^*) ρόφηση;

$$C(x,t) = C_o \cdot \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$$

$$n = 0.3$$

$$G_s = 2.65, \rho_w = 1 \text{ g/cm}^3$$

$$K_p = 1 \text{ l/kg} = 1 \text{ cm}^3/\text{g}$$

$$\rho_d = (1-n) G_s \rho_w = 1.86 \text{ g/cm}^3$$

$$R = 1 + \frac{\rho_d K_p}{n} = 1 + \frac{1.86 \times 1}{0.3} = 7.2$$

$$D_e = \omega D_\delta = 0.7 \times 10^{-9} \text{ m}^2 / \text{s} = 0.0221 \text{ m}^2 / \text{y}$$

$$D_e^* = \frac{D_e}{R} = 0.0031 \text{ m}^2 / \text{y}$$

- Εκφράζω τα αποτελέσματα ως $C(x, 100)/C_o$

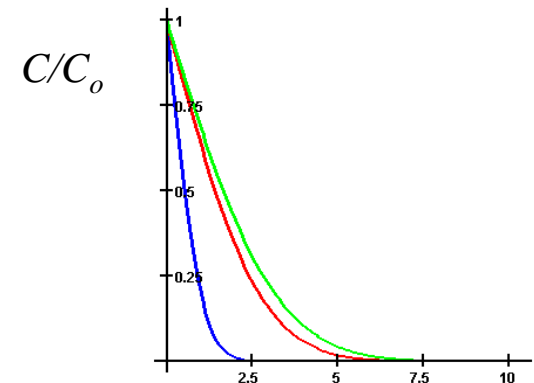
Παράδειγμα: εξάπλωση ρύπου λόγω διάχυσης σε διάλυμα και σε έδαφος, συν.

- Υπολογίζω το όρισμα της συμπληρωματικής συνάρτησης σφάλματος, erf, για $t=100$ y και $x = 1, 5, 10$ m και από τον πίνακα διαβάζω τις τιμές της

$x(m)$	$t(y)$	ΔΙΑΛΥΜΑ		ΕΔΑΦΟΣ, $R=1$		ΕΔΑΦΟΣ, $R=7.2$	
		$\frac{x}{2\sqrt{D_s t}}$	C/C_o	$\frac{x}{2\sqrt{D_e t}}$	C/C_o	$\frac{x}{2\sqrt{D_e^* t}}$	C/C_o
1	100	0.28	~0.7	0.34	~0.62	0.9	0.2
5	100	1.4	0.05	1.7	0.02	4.5	~0
10	100	2.8	~0	3.4	~0	9	~0

↑
υπολογίζω

↑
βρίσκω
από πίνακα
(βλ. επόμενη
διαφάνεια)



Απόσταση από την πηγή (m)

Τιμές της συνάρτησης σφάλματος

α	$erf(\alpha)$	$erfc(\alpha)$	α	$erf(\alpha)$	$erfc(\alpha)$
0	0	1.0	1.1	0.880205	0.119795
0.05	0.056372	0.943628	1.2	0.910314	0.089686
0.1	0.112463	0.887537	1.3	0.934008	0.065992
0.15	0.167996	0.832004	1.4	0.952285	0.047715
0.2	0.222703	0.777297	1.5	0.966105	0.033895
0.25	0.276326	0.723674	1.6	0.976348	0.023652
0.3	0.328627	0.671373	1.7	0.983790	0.016210
0.35	0.379382	0.620618	1.8	0.989091	0.010909
0.4	0.428392	0.571608	1.9	0.992790	0.007210
0.45	0.475482	0.524518	2.0	0.995322	0.004678
0.5	0.520500	0.479500	2.1	0.997021	0.002979
0.55	0.563323	0.436677	2.2	0.998137	0.001863
0.6	0.603856	0.396144	2.3	0.998857	0.001143
0.65	0.642029	0.357971	2.4	0.999311	0.000689
0.7	0.677801	0.322199	2.5	0.999593	0.000407
0.75	0.711156	0.288844	2.6	0.999764	0.000236
0.8	0.742101	0.257899	2.7	0.999866	0.000134
0.85	0.770668	0.229332	2.8	0.999925	0.000075
0.9	0.796908	0.203092	2.9	0.999959	0.000041
0.95	0.820891	0.179109	3.0	0.999978	0.000022
1.0	0.842701	0.157299			

Συμπερασματικά σχόλια

- Μικρή(;) η εξάπλωση της ρύπανσης λόγω διάχυσης και μόνον
 - ναι, μικρή για έναν ρυπασμένο χώρο
 - σημαντική για άλλες εφαρμογές, πχ για το στρώμα στεγάνωσης πυθμένα ΧΥΤΑ
- Μετά (το πείραμα στην τάξη με τα σοκολατάκια και) την επιτόπου δοκιμή με ιχνηθέτες στον χώρο Borden, βλέπουμε και από τη μαθηματική περιγραφή της μεταφοράς ότι η ρόφηση καθυστερεί την εξάπλωση της ρύπανσης

Ευρύτερα σχόλια

- Τα φαινόμενα παρουσιάζονται ένα-ένα (διάχυση μόνον, διάχυση πρώτα χωρίς ρόφηση, μετά με ρόφηση) αποκλειστικά για εκπαιδευτικούς σκοπούς
 - ρόφηση (όπως και διάχυση) έχουμε πάντα – αν ο μηχανικός την αγνοήσει, πρέπει να τεκμηριώσει την απόφασή του
 - η ίδια **απαίτηση τεκμηρίωσης** ισχύει για **κάθε απόφαση**
 - πχ απόφαση να αγνοηθεί οποιοδήποτε φαινόμενο που εμπλέκεται στη μεταφορά – πρέπει να μπορούμε να εκτιμήσουμε (α) τη σχετική συμβολή του φαινομένου και (β) αν είναι υπέρ της ασφάλειας να αγνοηθεί