

Politechnika Krakowska
Wydział Inżynierii Środowiska

Marek Kubala

**Teoretyczna analiza wpływu wybranych czynników
na propagację zanieczyszczeń w sieci wodociągowej**

rozprawa doktorska

Promotor:

dr hab. inż. Krzysztof Knapik, prof. PK

Kraków 2005



Spis treści

Oznaczenia	3
Wstęp	5
Cel, teza i zakres pracy	10
I. Opis problemu	12
I.1. Transport zanieczyszczeń w rurociągu	12
I.2. Dyfuzja turbulentna	13
I.3. Dyspersja mechaniczna	19
I.4. Profil prędkości przepływu w rurociągu	21
I.5. Zmiany stężenia wskutek aktywności chemicznej zanieczyszczenia	29
II. Analiza czynników wpływających na wielkość współczynnika dyspersji mechanicznej	35
II.1. Dotychczasowe oszacowania współczynnika dyspersji	35
II.2. Obliczenia współczynnika dyspersji	37
II.3. Dyskusja otrzymanych wyników	45
III. Analiza wpływu nieliniowości reakcji chemicznej na rozwiązania równania adwekcyjno-dyfuzyjnego z członem reakcji	49
III.1. Przykłady rozwiązań analitycznych dla liniowego członu reakcji	49
III.2. Propozycja rozwiązania dla nieliniowego członu reakcji metodą dekompozycji obszaru	51
IV. Propozycję algorytmu symulacji rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń podlegających nieliniowym zmianom stężenia	53
IV.1. Przegląd dotychczas stosowanych algorytmów symulacji rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń	53
IV.2. Propozycja algorytmu opartego na modelu analizy wędrownej	60
V. Podsumowanie i wnioski	61
Literatura	63

Oznaczenia

- a – stała reakcji chemicznej
- A – stała tłumienia w modelu van Driesta
- A_0 – czynnik przedwykładniczy w równaniu Arrheniusa
- b – rząd reakcji chemicznej (parametr nieliniowości reakcji chemicznej)
- c – stężenie lokalne substancji w płynie
- C – stała w profilu prędkości
- $\langle c \rangle$ – część ustalona stężenia (w czasie uśredniania t_1)
- \tilde{c} – fluktuacje stężenia w ruchu turbulentnym
- \bar{c} – uśrednione po przekroju strumienia stężenie substancji w płynie
- D – współczynnik dyspersji
- D_m – współczynnik dyfuzji molekularnej
- E_a – energia aktywacji reakcji w równaniu Arrheniusa
- \mathbf{f} – wektor rozkładu sił masowych
- h – stała Plancka
- ΔH^\ddagger – entalpia aktywacji
- \mathbf{j} – strumień masy
- k_B – stała Boltzmanna
- l_* – długość dynamiczna
- m – masa substancji rozpuszczonej
- p – ciśnienie hydrostatyczne
- Pr_t – turbulentna liczba Prandtla, tutaj $Pr_t = 1$
- q – wydatek cieplny w dwupunktowej postaci równania Arrheniusa
- Q – człon źródeł i upustów w równaniu ewolucji stężenia substancji w płynie
- r – współrzędna przestrzenna prostopadła do osi przewodu (odległość od osi)
- R – promień przekroju poprzecznego przewodu o symetrii osiowej (rury)
- R – stała gazowa
- Re – liczba Reynoldsa
- Re_* – promień przekroju poprzecznego przewodu o symetrii osiowej (rury), wyrażony w bezwymiarowych współrzędnych wewnętrznych: $Re_* = Ru_*/\nu$
- ΔS^\ddagger – entropia aktywacji
- t – współrzędna czasowa
- T – temperatura w skali bezwzględnej
- \mathbf{u} – wektor prędkości lokalnej

- $\langle \mathbf{u} \rangle$ – część ustalona wektora prędkości lokalnej (w czasie uśredniania t_1)
- $\tilde{\mathbf{u}}$ – fluktuacje wektora prędkości lokalnej
- u – składowa osiowa prędkości przepływu
- $\langle u \rangle$ – część ustalona składowej osiowej prędkości przepływu (w czasie uśredniania t_1)
- \tilde{u} – fluktuacje składowej osiowej prędkości przepływu w ruchu turbulentnym
- \bar{u} – średnia prędkość przepływu (uśredniona po przekroju strumienia)
- u' – zmienna składowa profilu prędkości przepływu $u' = \langle u \rangle - \bar{u}$
- u_* – prędkość dynamiczna
- x – współrzędna przestrzenna wzdłuż osi przewodu w układzie Eulera (stałym)
- x' – współrzędna przestrzenna wzdłuż osi przewodu w układzie Lagrange'a (poruszającym się ze średnią prędkością przepływu \bar{u}), $x' = x - \bar{u}t$
- y – współrzędna przestrzenna prostopadła do ściany przewodu (odległość od ściany)
- ε_y – współczynnik dyfuzji turbulentnej w kierunku prostopadłym do ściany przewodu
- η – bezwymiarowa odległość od ściany przewodu (tzw. współrzędne wewnętrzne),
 $\eta = y/l_* = yu_*/\nu$
- κ – stała von Kármána
- μ – dynamiczny współczynnik lepkości
- μ_t – dynamiczny współczynnik lepkości turbulentnej
- ν – kinematyczny współczynnik lepkości
- ν_t – kinematyczny współczynnik lepkości turbulentnej
- Π – współczynnik mocy funkcji śladu
- ρ – gęstość płynu
- ξ – bezwymiarowa odległość od ściany przewodu (tzw. współrzędne zewnętrzne),
 $\xi = y/R$

Wstęp

Problem jakości wody pitnej został dostrzeżony już w starożytności. Dbałość o jej jakość i czystość była wyrażana zarówno w tekstach medycznych jak i religijnych. Szczególnie ceniono sobie czystą wodę źródlaną, zwłaszcza górską. W celu jej dostarczenia do miast budowano imponujące budowle, które swą wielkością i doskonałością zadziwiają nawet współczesnych architektów. Akwedukty budowano już na starożytnym Wschodzie, ale najśłynniejsze z nich to tunel i akwedukt na wyspie Samos, wybudowany w VI w. p.n.e. z inicjatywy tyrana Polikratesa przez Eupalinosa z Megary i oczywiście słynne akwedukty rzymskie.

Rzymianie zwracali uwagę na wiele czynników wpływających na jakość wody. Witruwiusz w swym dziele *De Architectura Libri Decem*, powstałym zapewne pomiędzy 20 a 10 rokiem p.n.e., zajmując się w księdze ósmej zaopatrzeniem w wodę i budową akweduktów, zaleca, by doprowadzana woda była chroniona przed zanieczyszczeniami, a także, zdając sobie sprawę ze szkodliwości dla zdrowia par ołowiu i bieli ołowiowej, by przy budowie rurociągów używać raczej rur glinianych niż ołowianych¹. Natomiast z lektury *De aquae ductu Urbis Romae* Sextusa Juliusa Frontinusa (ok. 35–103 r.), *curatoris aquarum* od około roku 97, za panowania cesarzy Nerwy i Trajana, dowiadujemy się, że w Rzymie wody z sześciu akweduktów gromadzone były w krytych zbiornikach, „gdzie jakoby dla nabrania świeżego oddechu po swym biegu składały osad” (ks. I w. 19: *ubi quasi respirante rivorum cursu limum deponunt*)².

Chociaż zdawano sobie sprawę, że jakość wody ma duży wpływ na zdrowie człowieka, to jednak dopiero w drugiej połowie XIX wieku udało się udowodnić, wbrew istniejącym wtedy poglądom, że może być ona również nośnikiem czynników wywołujących epidemie chorób zakaźnych. Odkrycia tego dokonał londyński lekarz John Snow podczas trzeciej epidemii cholery, która nawiedziła Londyn w latach 1853–1854. Zarówno ta ostatnia, jak i poprzednia, w latach 1848–1849, były częścią pandemii cholery w latach 1846–1863. John Snow wykorzystał w swoich badaniach fakt, iż jedno z to-

¹ Vitruvius [Marcus Vitruvius Pollio] *De Architectura* [online], Bill Thayer's Web Site, Situ recensio IV Id. Feb. 01 [dostęp: 18 września 2002 r.]. Tryb dostępu: http://www.ukans.edu/history/index/europe/ancient_rome/L/Roman/Texts/Vitruvius/home.html. W języku polskim dostępne jest tłumaczenie: Witruwiusz, *O architekturze ksiąg dziesięć*. Przełożył Kazimierz Kumaniecki. Wstęp Anna Sadurska; Biblioteka Antyczna, Prószyński i S-ka, Warszawa 1999.

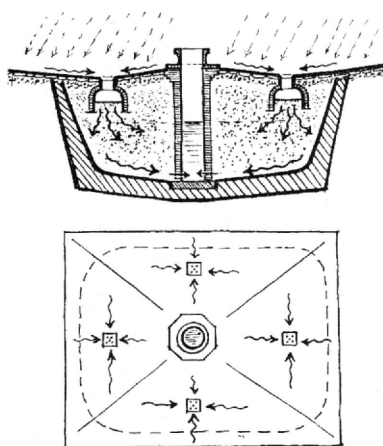
² Sextus Julius Frontinus *De Aquis* [online]. Bill Thayer's Web Site, Pagina recensa: a.d. XVI Kal. Jul. 01 [dostęp: 18 września 2002 r.]. Tryb dostępu: http://www.ukans.edu/history/index/europe/ancient_rome/L/Roman/Texts/Frontinus/De_Aquis/text*.html. W języku polskim dostępne jest tłumaczenie: Frontinus *O akweduktach miasta Rzymu*. Przełożył, opracował i wstępem opatrzył Cezary Kunderewicz, Instytut Historii Kultury Materialnej PAN, Warszawa 1961.

warzystw wodociągowych dostarczających wodę do południowych dzielnic Londynu, w których podczas poprzedniej epidemii (w latach 1848–1849) zachorowalność przewyższała 1%³, *The Lamberth Company*, w związku z ukończeniem jako czwarte w Londynie budowy stacji filtrów piaskowych, zmieniło w 1852 roku położenie swego ujęcia wody, przenosząc je w górny bieg Tamizy, gdzie jej nurt nie był zanieczyszczony ściekami miejskimi ani zasolony wodą pływów morskich. Pewne ulice zaopatrywane przez wodociągi *The Lamberth Company* były również zaopatrywane przez inne towarzystwo wodociągowe, *The Southwark and Vauxhall Company*, którego ujęcie wody z Tamizy mieściło się w centralnych rejonach Londynu. W ten sposób, jak to określił John Snow w swoim raporcie, „nie mniej niż trzysta tysięcy ludzi obu płci, w każdym wieku i wszystkich zawodów, wszystkich rang i stanowisk, od dobrze urodzonych po biedotę, zostało podzielone bez wyboru i w większości przypadków bezwiednie na dwie grupy; jedną, której dostarczano wody zawierającej londyńskie ścieki i drugą, spożywającą wodę prawie wolną od takich zanieczyszczeń”⁴. Aby uniknąć błędów klasyfikacyjnych, Snow wykorzystał fakt zasolenia wody z ujęcia wewnątrz Londynu, by ustalić źródło wody używanej w poszczególnych gospodarstwach domowych. Jego badania ujawniły, że w odróżnieniu od poprzedniej epidemii w roku 1849, kiedy to zachorowalność na cholere w obu populacjach była podobna, w trakcie następnej epidemii różnica była wyraźna. Na 10 000 gospodarstw domowych używających zanieczyszczonej wody dostarczanej z ujęcia z centrum Londynu przypadało 315 wypadków śmiertelnych zachorowań, podczas gdy w przypadku gospodarstw używających filtrowanej wody z czystszej ujęcia z górnego biegu Tamizy stosunek ten wynosił 37 śmiertelnych zachorowań na 10 000 gospodarstw. Dla pozostałych obszarów Londynu stosunek ten wynosił średnio 59 śmiertelnych zachorowań na 10 000 gospodarstw⁵.

³ Nicola Tynan, *Private Water Supply in Nineteenth Century London: Re-assessing the Externalities* [online]. NBER Summer Institute — Development of the American Economy, 25 June 2000 [dostęp: 18 września 2002 r.]. Dostępny w wersji Portable Document Format. Tryb dostępu: <http://www.nber.org/~confer/2000/si2000/tynan.pdf>.

⁴ John Snow, *On the Mode of Communication of Cholera*. Second Edition, much Enlarged, John Churchill, New Burlington Street, London MDCCCLV. Cytuję za: Ralph R. Frerichs, *History, maps and the internet: UCLA's John Snow site*, "The SoC Bulletin", 2000, vol. 34, no. 2. Pełny tekst tego właśnie wydania *On the Mode of Communication of Cholera* dostępny jest także w postaci elektronicznej w World Wide Web: *Mode of Communication of Cholera (John Snow, 1885)* [online], Department of Epidemiology, University of California, Los Angeles, School of Public Health. Last Updated 23 Aug 2001 [dostęp: 18 września 2002 r.]. Tryb dostępu: <http://www.ph.ucla.edu/epi/snow/snowbook.html>.

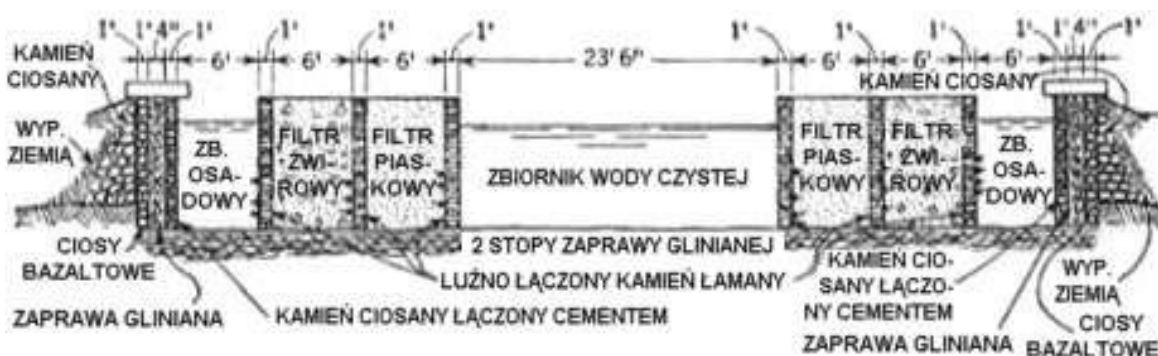
⁵ Ralph R. Frerichs, op. cit.



Rys. 1. Schemat *pozzo venetiano* z zaznaczonym przepływem wód. U góry przekrój pionowy, u dołu widok z góry.

Technika filtracji na złożu piaskowym znana już była wcześniej. W Wenecji zachowały się średnio-wieczne konstrukcje, zwane „studniami weneckimi” (*pozzo venetiano*), których zadaniem było gromadzenie i oczyszczanie wody deszczowej dla potrzeb konsumpcji. Konstrukcje te (Rys. 1) miały kształt wielkich mis czy też basenów wypełnionych piaskiem, których wieka stanowiły powierzchnie placów i podwórek. Woda opadowa, spływająca z placów przez otwory odpływowe, po przesączeniu przez zgromadzone w owych basenach złożu piasku, gromadziła się w ich dolnej części, skąd była pobierana za pomocą studni.

Na skalę przemysłową filtracja na złożu piaskowym po raz pierwszy zastosowana została w 1804 roku w bielarni Johna Gibba w Paisley koło Glasgow (Rys. 2), który nadmiar produkcji odsprzedawał dla potrzeb konsumpcji. Wkrótce w Glasgow w 1806 roku powstała już pierwsza doświadczalna stacja pracująca dla potrzeb wodociągów, jednakże ten wczesny eksperyment się nie udał. Dopiero prace inżyniera Johna Simpsona, pracującego dla londyńskiej *The Chelsea Water Works Company*, pozwoliły na udoskonalenie tej metody i zastosowanie jej w 1829 roku z sukcesem, który zachęcił inne spółki wodne do inwestycji w stacje filtrów piaskowych. To właśnie John Simpson kierował ukończoną w 1841 roku budową stacji filtrów piaskowych dla wspomnianej już *The Lamberth Company*⁶.



Rys. 2. Schemat stacji filtrów Johna Gibba w Paisley koło Glasgow. Wymiary podane w stopach ['] i calach [\"].

Wkrótce potem badania niemieckiego bakteriologa, Roberta Kocha, dotyczące epidemii cholery w Hamburgu, w 1892 roku, dostarczyły przekonujących dowodów znaczenia filtracji dla jakości zdrowotnej wody. Koch porównał ilości zachorowań na cholere w Hamburgu i sąsiedniej Altonie (obecnie dzielnicy Hamburga), której wodociągi były

⁶ Nicola Tynan, op. cit.

zasilane również wodą z Łaby, bezpośrednio poniżej ujęć Hamburga. Zachorowalność w Altonie była zdecydowanie mniejsza (epidemia obejmowała praktycznie jedynie ludzi używających wody ze studni), a jedyną różnicą był fakt, iż prywatna spółka zaopatrująca Altonę używała filtrów piaskowych opartych na technologii londyńskich spółek *The Chelsea Water Works Company* i *The Lamberth Company*, natomiast Hamburg oczyszczał wodę za pomocą sedymentacji⁷.

Ujawniło to potrzebę uzdatniania wody dla potrzeb konsumpcji. Na przełomie XIX i XX wieku rozwiązaniem tego problemu stała się dezynfekcja wody wprowadzanej do sieci wodociągowej, głównie poprzez jej chlorowanie. Metoda ta skutecznie wyeliminowała zagrożenie epidemiami chorób wywoływanych spożyciem zanieczyszczonej wody i jest do dzisiaj najczęściej używaną metodą dezynfekcji wody pitnej.

Jednak w ostatnich dziesięcioleciach XX wieku zwrócono uwagę na występowanie jeszcze innych zagrożeń związanych z jakością wody dostarczanej do konsumenta. Już w latach 70. zauważono korelacje pomiędzy chlorowaniem wody a występowaniem w niej szkodliwych dla zdrowia związków chloroorganicznych⁸. Doprowadziło to w latach 80. do wprowadzenia w wielu krajach regulacji prawnych (norm jakości wody) określających dopuszczalne stężenia w wodzie pitnej produktów pochodnych, powstałych wskutek uzdatniania wody wprowadzanej do systemów wodociągowych.

Powyższe fakty zmusiły dystrybutorów wody pitnej do zastosowania praktyki stałego śledzenia jakości dostarczanej wody i to nie tylko w miejscu wprowadzania jej do sieci wodociągowej, ale także w punktach jej poboru. W konsekwencji ujawniło to występowanie w wodzie wodociągowej szeregu wtórnych zanieczyszczeń, których pochodzenie jest różnorodnej natury: fizycznej, chemicznej i biologicznej. Istotne więc stało się śledzenie jakości wody w drodze od stacji uzdatniania do użytkownika.

Równoległy rozwój metod numerycznych i powszechna komputeryzacja stworzyły olbrzymie możliwości modelowania jakości wody w sieciach wodociągowych. Dało to do ręki inżynierom odpowiednie narzędzie do przewidywania zagrożeń pogorszenia jakości wody w sieci wodociągowej, rozpoznawania dróg rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w sieci i wykrywania ich źródeł na podstawie pomiarów jakości wody w wybranych punktach sieci. Powstało szereg programów, dzięki którym możliwa stała się symulacja pracy sieci wodociągowej i jakości wody w niej płynącej.

Ze względu na złożony charakter problemu symulacji pracy sieci wodociągowej, programy takie wymagają zastosowania szeregu uproszczeń, pozwalających na efek-

⁷ Ibidem.

⁸ Zob.: T. Bellar, J. Lichtenberg i R. Kroner, *The Occurrence of Organohalides in Chlorinated Drinking Water*, "Journal of American Water Works Association", vol. 66, 1974, p. 703; J. Rook, *Formation of Haloforms during Chlorination of Natural Water*, "Water Treatment and Examination", vol. 23, 1974, p. 234.

tywne wykorzystanie ograniczonej mocy obliczeniowej komputerów, w możliwym do przyjęcia czasie pracy. (Ideałem jest, aby symulacja odbywała się w czasie rzeczywistym lub nawet ten czas znacznie wyprzedzała). Uproszczenia te są trojakiemu rodzaju. Podstawowe uproszczenia wynikają z faktu, iż użytkownik symulatora jakości wody w sieci wodociągowej korzysta pośrednio z symulatora hydraulicznych warunków pracy sieci jako takiej, który to symulator wprowadza własne uproszczenia, związane przede wszystkim ze schematyzacją sieci, założeniem cyklicznej powtarzalności warunków pracy sieci oraz czasową i przestrzenną dyskretyzacją opisu jej pracy. Poza tym, symulacja jakości wody wprowadza własne uproszczenia. Mają one związek zarówno z opisem mechaniki przepływu substancji niesionej przez wodę (zjawiska adwekcji i dyspersji), jak i opisem reaktywności tej substancji.

Dotychczas tworzone symulatory uwzględniały jedynie zjawisko adwekcji, a reaktywność substancji była sprowadzana do przypadku nieodwracalnego rozpadu reagenta w objętości wody (według mniej lub bardziej złożonych schematów reakcji) lub nieodwracalnej adsorpcji na ścianach rurociągu. Nowsze programy symulacyjne próbują już uwzględniać zjawisko dyspersji i reakcje nieliniowe wykorzystując bezpośrednio osiągnięcia symulacji rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w kanałach otwartych i naturalnych ciekach wodnych.

Zadaniem niniejszej pracy jest zwrócenie uwagi na pewne problemy opisu rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w sieci wodociągowej związane ze zjawiskiem dyspersji mechanicznej w rurociągach oraz z nieliniowymi przemianami chemicznymi.

Cel, teza i zakres pracy

Systematyczne śledzenie publikacji i raportów, pojawiających się w literaturze fachowej, prowadzi do wniosku, iż dotychczas pomijane zjawisko dyspersji mechanicznej może w pewnych specyficznych przypadkach mieć kluczowe znaczenie w procesie rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń. Potrzeba uwzględnienia tego zjawiska napotyka jednak na szereg trudności: 1) samo oszacowanie zjawiska dyspersji w warunkach specyficznych dla sieci wodociągowej opiera się na badaniach z lat 1950. i bardzo istotne pomiary laboratoryjne przepływu cieczy przez rurociąg, dokonane w ostatniej dekadzie, nie były jeszcze pod tym względem opracowywane; 2) uwzględnienie zjawiska dyspersji komplikuje algorytm symulacyjny, gdyż wprowadza, obok czynnika reakcji chemicznej, dodatkowy czynnik zmiany stężenia; 3) sprzężenie efektów fizycznych zjawiska dyspersji i reakcji chemicznej powoduje konieczność łącznego ich rozpatrywania, a to dla reakcji nieliniowych, dla których nie istnieją analityczne rozwiązania równania adwekcyjno-dyspersyjnego z członem reakcji, powoduje konieczność wprowadzenia do algorytmu symulacyjnego kosztownej czasowo i niedokładnej (ze względu na efekt dyspersji numerycznej) procedury rozwiązania równania różnicowego.

Przedstawione powyżej uwagi pozwalają na sformułowanie następujących celów pracy:

- 1) analiza zjawiska dyspersji mechanicznej w warunkach przepływu cieczy przez rurociąg, przy uwzględnieniu najnowszych badań laboratoryjnych i ich opracowań;
- 2) analiza wzajemnego sprzężenia członów dyspersji i reakcji chemicznej w równaniu adwekcyjno-dyspersyjnym z członem reakcji nieliniowej, przy uwzględnieniu najnowszych osiągnięć w dziedzinie rozwiązywania nieliniowych równań różniczkowych;
- 3) propozycja efektywnego algorytmu symulacji rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w wodociągach, uwzględniającego rozwiązanie otrzymane w punkcie 2).

Powyższe cele mają w zamyśle autora pracy uzasadnić następującą tezę:

Postęp w dziedzinie pomiarów struktury w pełni rozwiniętego przepływu turbulentnego w rurociągu i rozwój metod rozwiązywania nieliniowych równań różniczkowych umożliwiają opracowanie efektywnych metod symulacji przebiegu zjawisk towarzyszących rozprzestrzenianiu się zanieczyszczeń w sieciach wodociągowych, w celu prognozowania ewentualnych zagrożeń skażeniami.

Przy tak sformułowanych celach i tezie praca zawiera:

- I. Opis problemu — w którym przedstawione zostały teoretyczne podstawy opisu następujących zjawisk:
 1. Transportu zanieczyszczeń w rurociągu.
 2. Dyfuzji turbulentnej.
 3. Dyspersji mechanicznej.
 4. Zmiennego profilu poprzecznego prędkości przepływu płynu w rurociągu.
 5. Zmian stężenia wskutek aktywności chemicznej zanieczyszczenia.
- II. Analizę czynników wpływających na wielkość współczynnika dyspersji mechanicznej — która zawiera:
 1. Opis dotychczasowych oszacowań tego współczynnika.
 2. Obliczenie współczynnika dyspersji na podstawie dostępnych autorowi pomiarów profilu prędkości przepływu turbulentnego w rurociągu.
 3. Dyskusję otrzymanych wyników.
- III. Analizę wpływu nieliniowości reakcji chemicznej na rozwiązania równania adwekcyjno-dyfuzyjnego z członem reakcji — która zawiera:
 1. Przykłady rozwiązań analitycznych dla liniowego członu reakcji.
 2. Propozycję rozwiązania dla nieliniowego członu reakcji przy użyciu metody dekompozycji obszaru.
- IV. Propozycję algorytmu symulacji rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń podlegających nieliniowym zmianom stężenia — która zawiera:
 1. Przegląd dotychczas stosowanych algorytmów symulacji rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń.
 2. Propozycję algorytmu dla modelu analizy wędrownej opartą na dekompozycji równania transportu na część adwekcyjną i część dyfuzyjną z dodatkowym członem reakcji nieliniowej.
- V. Podsumowanie i wnioski.

I. Opis problemu

Poniższe rozważania dotyczą ewolucji czasowo-przestrzennej jakiejkolwiek wielkości skalarnej, opisującej własność nieściśliwego płynu newtonowskiego podczas transportu w przewodzie zamkniętym o przekroju kołowym, jednakże ze względu na cel pracy będziemy mówić o *transportie zanieczyszczeń w rurociągu* lub o *stężeniu zanieczyszczenia w wodzie*.

I.1. Transport zanieczyszczeń w rurociągu

Rozważmy bilans masy substancji rozpuszczonej w objętości V , o powierzchni $\partial V = S$. Strumień masy \mathbf{j} przez jednostkę powierzchni S można opisać równaniem:

$$\mathbf{j} = \mathbf{u} \cdot c - \mathbf{D} \cdot \text{grad } c \quad \text{I.1.1,}$$

gdzie współczynnik dyfuzji \mathbf{D} w ogólności ma charakter wielkości tensorowej. Masa wypływająca przez powierzchnię S w jednostce czasu:

$$\dot{m}_1 = \iint_S (\mathbf{u} \cdot c - \mathbf{D} \cdot \text{grad } c) dS \quad \text{I.1.2;}$$

natomiast masa gromadzona w objętości V w jednostce czasu:

$$\dot{m}_2 = \iiint_V \frac{\partial c}{\partial t} dV \quad \text{I.1.3.}$$

Jeśli ponadto wewnątrz tej objętości istnieje źródło o wydajności Q , to masa dostarczana przez nie w jednostce czasu:

$$\dot{m}_3 = \iiint_V Q dV \quad \text{I.1.4.}$$

Bilans tych mas:

$$\dot{m}_1 + \dot{m}_2 = \dot{m}_3 \quad \text{I.1.5}$$

można wyrazić zatem w postaci równania:

$$\iint_S (\mathbf{u} \cdot c - \mathbf{D} \cdot \text{grad } c) dS + \iiint_V \frac{\partial c}{\partial t} dV = \iiint_V Q dV \quad \text{I.1.6.}$$

Stosując dla pierwszego członu różniczkowe prawo Gaussa otrzymujemy:

$$\iiint_V \text{div}(\mathbf{u} \cdot c - \mathbf{D} \cdot \text{grad } c) dV + \iiint_V \frac{\partial c}{\partial t} dV = \iiint_V Q dV \quad \text{I.1.7,}$$

a w postaci lokalnej (różniczkowej):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(\mathbf{u} \cdot c - \mathbf{D} \cdot \text{grad } c) + Q \quad \text{I.1.8.}$$

W przypadku transportu dyfuzyjnego substancji rozpuszczonej w wodzie, dyfuzja ma charakter izotropowy, zatem współczynnik dyfuzji redukuje się do wielkości skalarnej, zależnej jedynie od lokalnej temperatury. Rozsądnie jest ponadto założyć pewną stałą temperaturę wody, co w świetle dalszych rozważań, dotyczących skali zjawiska dyfuzji,

okaże się znikomym błędem. Powyższe rozważania redukują współczynnik dyfuzji molekularnej do stałej, ze względu na współrzędną czasową i współrzędne przestrzenne, wartości D_m , co w efekcie upraszcza równanie 1.1.8 do postaci równania adwekcyjno-dyfuzyjnego, z dodatkowym członem źródeł i upustów:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla(\mathbf{u} \cdot c) - D_m \cdot \nabla^2 c + Q \quad 1.1.9.$$

Równanie powyższe ma charakter ogólny, trójwymiarowy, nie nawiązujący do specyficznej geometrii przepływu w rurociągu. Użytkownika symulatora jakości wody w sieci wodociągowej, ze względu na quasi-jednowymiarową geometrię rurociągu, nie interesuje poprzeczny rozkład ani prędkości przepływu, ani stężenia zanieczyszczenia. Dlatego podczas symulacji zarówno pracy sieci wodociągowej, jak i jakości wody w niej przepływającej, bierze się pod uwagę własności płynu (wody) uśrednione po przekroju poprzecznym rury:

$$\bar{c}(x, t) = \frac{2}{R^2} \int_0^R c(x, r, t) \cdot r dr \quad 1.1.10$$

oraz

$$\bar{u}(x, t) = \frac{2}{R^2} \int_0^R u(x, r, t) \cdot r dr \quad 1.1.11$$

W powyższych dwóch wzorach pominięta została współrzędna kątowa współrzędnych walcowych (układu naturalnego dla geometrii rury), gdyż zakładamy osiową symetrię problemu. Wprowadzenie wartości uśrednionych prowadzi do uproszczenia równania 1.1.9 do postaci jednowymiarowej:

$$\frac{\partial \bar{c}(x, t)}{\partial t} = \bar{u}(t) \cdot \frac{\partial \bar{c}(x, t)}{\partial x} - D_m \cdot \frac{\partial^2 \bar{c}(x, t)}{\partial x^2} + \bar{Q}(x, t) \quad 1.1.12$$

i to równanie jest podstawą do wszelkich symulacji jakości wody w sieci dystrybucji wody. Jednak dokonanie tego zabiegu na tym etapie rozważań prowadzi do pominięcia bardzo ważnego zjawiska związanego z mechaniką przepływu — dyfuzji turbulentnej.

1.2. Dyfuzja turbulentna

Przepływ wody w rurociągu sieci dystrybucji wody ma prawie zawsze charakter burzliwy (turbulentny). Charakteryzuje się on występowaniem fluktuacji prędkości wewnątrz strumienia. Zjawisko to powodowane jest wyodrębnianiem się w przepływie pewnych autonomicznie zachowujących się struktur, zwanych *strukturami koherentnymi*, dla których można wyróżnić dwie skale — skalę dużych wirów, zwaną często skalą zewnętrzną turbulencji i skalę wirów małych, ulegających dyssypacji wskutek sił lepkości. Duże wiry ulegają rozpadowi na mniejsze, praktycznie bez dyssypacji energii, aż do skali wirów małych. Widmo skal pomiędzy skalą zewnętrzną a skalą wirów małych jest ciągłe, ale rozłączne ze skalą drogi swobodnej ruchów molekularnych, odpowiadających za zja-

wisko dyfuzji molekularnej. Skali drogi swobodnej ruchów molekularnych odpowiada w ruchu turbulentnym skala *drogi mieszania*, na którą element płynu może unieść swe właściwości charakterystyczne (np. lokalne stężenie rozpuszczonych w wodzie substancji, lokalny pęd, temperaturę itp.) bez wyrównania ich z otoczeniem. Powoduje to, w przypadku przenoszenia takich właściwości płynu jak temperatura czy stężenie substancji w nim rozpuszczonych, powstanie dodatkowego efektu o charakterze dyfuzyjnym, zwanego *dyfuzją turbulentną*. Efekt ten jest zazwyczaj parę rzędów wielkości silniejszy niż dyfuzja molekularna (dla temperatury 20°C współczynnik dyfuzji molekularnej w wodzie ma wartość rzędu $10^{-3} \text{ mm}^2/\text{s}$, podczas gdy dla typowego, średniego przepływu w rurociągu, o liczbie Reynoldsa 10 000, współczynnik dyfuzji turbulentnej jest rzędu $10 \text{ mm}^2/\text{s}$), dlatego też w opisie zjawisk dyfuzyjnych zachodzących w przepływie turbulentnym dyfuzja molekularna jest pomijana. Transport pędu przez struktury koherentne powoduje zmianę profilu prędkości cieczy wewnątrz przewodu (spłaszczenie profilu) czy w pobliżu ściany ciała opływanego.

Ponieważ trudno jest śledzić w ruchu turbulentnym zmiany prędkości pojedynczej cząstki, więc dla pomiarów prędkości przy tego typu przepływach dokonywana jest analiza Eulera, to znaczy w ustalonych punktach. Spektrum wirów przepływając przez punkt z prędkością średnią nakłada się na stałą składową prędkości. Duże wiry tworzą długookresowe fluktuacje prędkości, a wiry małe — fluktuacje krótkookresowe. Jeśli rozważymy krótki okres pomiaru prędkości, to fluktuacje te wydają się wysoce skorelowane, ale w dłuższym okresie korelacje zanikają. Skalę czasową zaniku korelacji zmian prędkości nazywamy *okresem uśredniania* t_1 . W analizie Lagrange’a jest to czas, po którym cząstka wody „zapomina” swoją prędkość początkową. Odpowiednikiem skali czasowej jest charakterystyczna długość l_1 , którą można utożsamiać ze wspomnianą już *drogą mieszania*.

Tworząc podstawy teorii przepływów turbulentnych, sir Osborne Reynolds zasugerował⁹, że dla czasów większych niż t_1 , dla dowolnego punktu x_0 można dokonać dekompozycji prędkości na część ustaloną $\langle \mathbf{u} \rangle$ (w skali czasowej t_1 , a w rzeczywistości wolnozmienną, quasi–ustaloną) i fluktuacje $\tilde{\mathbf{u}}$:

$$\mathbf{u}(x_0, t) = \langle \mathbf{u} \rangle(x_0, t) + \tilde{\mathbf{u}}(x_0, t) \quad \text{I.2.1.}$$

W takim przypadku czas t_1 jest czasem potrzebnym na to, by ustaliła się wartość $\langle \mathbf{u} \rangle$.

⁹ O. Reynolds *On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of criterion*, “Philosophical Transactions of The Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences”, vol. 186, 1895, pp. 123–164.

Podobny zabieg możemy przeprowadzić dla dowolnej wielkości skalarnej opisującej pewną własność wody, na przykład stężenia rozpuszczonych w niej substancji:

$$c(x_0, t) = \langle c \rangle(x_0, t) + \tilde{c}(x_0, t) \quad 1.2.2.$$

Pozwala to na dokonanie dekompozycji równania adwekcyjno-dyfuzyjnego:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla(\mathbf{u} \cdot c) - D_m \cdot \nabla^2 c \quad 1.2.3.$$

Z definicji czasu całkowania t_1 wynika, że po scałkowaniu równań 1.2.1 i 1.2.2 w granicach od 0 do t_1 człony fluktuacyjne znikają, a zatem po scałkowaniu równania 1.2.3 znikną też człony mieszane $\tilde{c}\langle \mathbf{u} \rangle$ oraz $\langle c \rangle \tilde{\mathbf{u}}$ i w efekcie równanie to przyjmie postać:

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} + \nabla(\langle \mathbf{u} \rangle \langle c \rangle) + \nabla \langle \tilde{\mathbf{u}} \tilde{c} \rangle = D_m \nabla^2 \langle c \rangle \quad 1.2.4,$$

gdzie $\langle \tilde{\mathbf{u}} \tilde{c} \rangle$ oznacza uśrednienie w czasie t_1 iloczynu $\tilde{\mathbf{u}} \tilde{c}$.

Obecność niezerowego iloczynu $\langle \tilde{\mathbf{u}} \tilde{c} \rangle$ oznacza, że fluktuacje prędkości i stężenia są w jakiś sposób ze sobą skorelowane i ta właśnie korelacja powoduje występowanie dodatkowego czynnika transportu, zwanego *dyfuzją turbulentną*. Iloczyn ten ma wymiar strumienia masy i przez analogię do prawa Ficka dla dyfuzji molekularnej może on być w podobny sposób opisany jako dyfuzyjny przepływ masy, proporcjonalny do gradientu uśrednionego w czasie t_1 stężenia:

$$\langle \tilde{\mathbf{u}} \tilde{c} \rangle = -\varepsilon_t \nabla \langle c \rangle \quad 1.2.5.$$

Transport masy wskutek dyfuzji turbulentnej jest przynajmniej kilka rzędów większy niż wskutek dyfuzji molekularnej, tak więc człon dyfuzji molekularnej w dalszych równaniach można pominąć. Ostatecznie więc równanie 1.2.4 przyjmie postać:

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} + \nabla(\langle \mathbf{u} \rangle \langle c \rangle) = \nabla(\varepsilon_t \nabla \langle c \rangle) \quad 1.2.6.$$

Zjawisko dyfuzji turbulentnej powstaje wskutek przenoszenia lokalnego stężenia zanieczyszczenia (jako pewnej skalarnej własności płynu) przez wiry małej skali. Jest to mechanizm analogiczny do przenoszenia lokalnego pędu (własności wektorowej) przez te same struktury, odpowiedzialnego za powstawanie zjawiska lepkości turbulentnej. Wielkością analogiczną do współczynnika dyfuzji turbulentnej ε_t jest dla zjawiska przenoszenia pędu kinematyczny współczynnik lepkości turbulentnej ν_t . Współczynnik proporcjonalności pomiędzy tymi wielkościami jest nazywany *turbulentną liczbą Prandtla*. W przypadku substancji całkowicie rozpuszczonej, kiedy jej stężenie można traktować właśnie jako pewną skalarną własność płynu, można przyjąć, że turbulentna liczba Prandtla jest równa 1.

W przypadku cieczy nieściśliwej zjawisko przenoszenia lokalnego pędu sprowadza się do przenoszenia lokalnej prędkości, objawiającego się jej fluktuacjami. Aby więc opisać to zjawisko, należy poddać dekompozycji Reynoldsa równania ciągłości i zachowania pędu.

Równanie ciągłości dla cieczy nieściśliwej:

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad \text{I.2.7,}$$

ze względu na definicję $\langle \mathbf{u} \rangle$, po uśrednieniu w czasie t_1 przyjmie postać:

$$\operatorname{div} \langle \mathbf{u} \rangle = 0 \quad \text{I.2.8.}$$

Równanie Naviera–Stokesa (będące równaniem zachowania pędu dla płynu newtonowskiego nieściśliwego):

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \operatorname{grad} \mathbf{u} = \rho \mathbf{f} - \operatorname{grad} p + \mu \Delta \mathbf{u} \quad \text{I.2.9}$$

można również zapisać w postaci:

$$\rho \frac{\partial \langle \mathbf{u} \rangle}{\partial t} + \rho \operatorname{div}(\mathbf{u}\mathbf{u}) = \rho \mathbf{f} - \operatorname{grad} p + \mu \Delta \mathbf{u} \quad \text{I.2.10.}$$

Wynika to z faktu, iż dla cieczy nieściśliwej, przy uwzględnieniu I.2.7:

$$\operatorname{div}(\mathbf{u}\mathbf{u}) = \mathbf{u} \operatorname{grad} \mathbf{u} + \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{u} = \mathbf{u} \operatorname{grad} \mathbf{u} \quad \text{I.2.11.}$$

Występująca w równaniu diada $\mathbf{u}\mathbf{u}$ po uśrednieniu w czasie t_1 przyjmie postać:

$$\langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle = \langle \mathbf{u} \rangle \langle \mathbf{u} \rangle + \langle \tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}} \rangle \quad \text{I.2.12.}$$

Jeśli uwzględnimy ponadto, że dla prędkości uśrednionej zachodzi analogiczny związek, jak w równaniu I.2.11, to otrzymamy równanie Reynoldsa dla średniej prędkości ruchu turbulentnego:

$$\rho \frac{\partial \langle \mathbf{u} \rangle}{\partial t} + \rho \langle \mathbf{u} \rangle \operatorname{grad} \langle \mathbf{u} \rangle = \rho \mathbf{f} - \operatorname{grad} p + \mu \nabla^2 \langle \mathbf{u} \rangle - \rho \operatorname{div}(\langle \tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}} \rangle) \quad \text{I.2.13.}$$

W równaniu Reynoldsa, będącym wersją równania Naviera–Stokesa dla przepływów burzliwych, dodatkowym elementem naprężeń, oprócz ciśnienia hydrostatycznego p i naprężeń lepkościowych $\mu \nabla \langle \mathbf{u} \rangle$, są naprężenia turbulentne, zwane też naprężeniami Reynoldsa, które pojawiają się w równaniu w postaci diady $-\rho \langle \tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}} \rangle$. Jest to tensor symetryczny, którego elementy diagonalne określają naprężenia normalne, a elementy nediagonalne — naprężenia styczne. Widać więc, że naprężenia turbulentne (naprężenia Reynoldsa) powstają wskutek niezerowej autokorelacji fluktuacji prędkości i aby móc rozwiązać równanie Reynoldsa, należy znaleźć dla tej autokorelacji dodatkowe równanie. Nazywane jest to domknięciem równania Reynoldsa i jest przedmiotem modelowania ruchu turbulentnego.

Najprostszymi modelami domknięcia są modele oparte na hipotezie lepkości turbulentnej Boussinesq'a¹⁰, zakładającej analogię pomiędzy naprężeniem lepkościowym:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial \langle u \rangle_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u \rangle_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{I.2.14}$$

a naprężeniem turbulentnym:

$$-\rho \langle \tilde{u}\tilde{u} \rangle_{ij} \equiv [\tau_t]_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial \langle u \rangle_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u \rangle_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{I.2.15,}$$

gdzie μ_t jest dynamicznym współczynnikiem lepkości turbulentnej i jego wartość w danym punkcie zależy od intensywności turbulencji oraz skali dominujących wirów. Równanie I.2.15 nie opisuje jednak korelacji fluktuacji prędkości, należy je traktować raczej jako definicję współczynników lepkości turbulentnej: dynamicznego — μ_t , a także kinematycznego — $\nu_t = \mu_t / \rho$.

W przypadku przepływu przez rurociąg, możemy ze względu na symetrię układu założyć, że niezerowa jest tylko składowa prędkości wzdłuż rurociągu, $\langle \mathbf{u} \rangle_x = \langle u \rangle$, która jest funkcją jedynie odległości od jego ściany $y = R - r$, co pozwala zredukować wyrażenie I.2.15 do postaci:

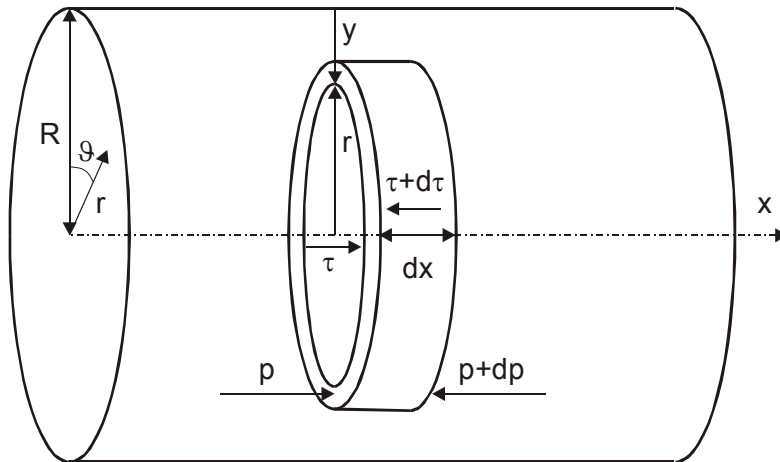
$$\tau_t = \mu_t \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} = \rho \nu_t \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} \quad \text{I.2.16.}$$

Dalszy proces modelowania polega na określeniu wielkości skalarnych, od których miałyby zależeć lepkość turbulentna ν_t i domknięciu równana Reynoldsa równaniami transportu dla każdej z tych wielkości. Najprostszy model domknięcia zostanie przedstawiony w części dotyczącej profilu prędkości przepływu.

Jeśli weźmiemy pod uwagę geometrię rozważanego problemu (przepływ w przewodzie zamkniętym o symetrii osiowej), to równanie I.2.16 pozwala na ścisłe określenie związku pomiędzy profilem prędkości przepływu a współczynnikiem ν_t .

Rozważmy siły działające na element płynu w postaci słoja symetrycznego względem osi rurociągu, o promieniu r , grubości dr i długości dx , podczas transportu w rurociągu.

¹⁰ M. J. Boussinesq *Théorie de l'écoulement tourbillant*. Mémoires présentés par divers Savants à l'Académie des Sciences de l'Institut National de France, tome XXIII, no. 1, Paris 1877, pp. 46–50; idem: *Essai sur la théorie des eaux courantes*. Mémoires présentés par divers Savants à l'Académie des Sciences de l'Institut National de France, tome XXIII, no. 1, Paris 1877, pp. 380–398.



Rys. 3. Schemat sił działających na element płynu podczas przepływu w rurociągu.

Cały płyn, a wraz z nim rozważany element, porusza się ze stałą prędkością, a zatem działające nań siły muszą się równoważyć. Siły parcia na boczne ściany elementu (na Rys. 3 są to ściany równoległe do osi x) równoważą się ze względu na symetrię osiową jego kształtu, natomiast siły parcia na górną i dolną ścianę są równoważone siłami ścinającymi, powstałymi wskutek działania naprężeń stycznych na ścianach bocznych. Przyjmując oznaczenia jak na Rys. 3 możemy stworzyć bilans tych sił:

$$\pi \left[(r + dr)^2 - r^2 \right] dp + 2\pi r \tau dx - 2\pi (r + dr)(\tau + d\tau) dx = 0 \quad \text{I.2.17.}$$

Po rozwinięciu i zredukowaniu tylko do różniczek drugiego rzędu, powyższy bilans można przedstawić w postaci:

$$r \frac{dp}{dx} - \frac{d(r\tau)}{dr} = 0 \quad \text{I.2.18.}$$

Całkując to równanie względem zmiennej r i przyjmując, że na ścianie rurociągu, czyli dla $r = R$, naprężenie styczne wynosi τ_0 , otrzymujemy:

$$\tau = \tau_0 \frac{r}{R} = \tau_0 (1 - \xi) \quad \text{I.2.19.}$$

Pomijając naprężenia lepkościowe, z porównania równań I.2.16 i I.2.19 otrzymujemy następującą zależność pomiędzy kinematycznym współczynnikiem lepkości turbulentnej a profilem poprzecznym prędkości przepływu przez rurociąg:

$$v_t = \frac{\tau_0}{\rho} \frac{R - y}{R (\partial \langle u \rangle / \partial y)} = - \frac{\tau_0}{\rho} \frac{r/R}{\partial \langle u \rangle / \partial r} \quad \text{I.2.20.}$$

Jest to kluczowa zależność, pozwalająca, na podstawie profilu prędkości przepływu, precyzyjnie wyznaczyć (dzięki analogii Reynoldsa) wartość współczynnika dyfuzji turbulentnej w każdym punkcie przekroju poprzecznego strumienia, bez oglądania się na mniej lub bardziej przystające do rzeczywistości modele tego zjawiska. Warto zauważyć,

że współczynnik ε_t (utożsamiany z ν_t) jest funkcją jedynie odległości od ściany rurociągu (lub poprzez prostą transformację funkcją odległości od jego osi).

I.3. Dyspersja mechaniczna

Zjawisko dyspersji mechanicznej odkrył w 1953 roku G. I. Taylor¹¹, który rozważał przypadek jednorodnego przepływu w długiej, prostej rurze. Wykorzystując swoją statystyczną teorię dyfuzji turbulentnej¹², doszedł do wniosku, że cały proces transportu masy, uśrednionego po przekroju poprzecznym strumienia, w tych warunkach może być opisany, w układzie poruszającym się ze średnią prędkością przepływu wzdłuż przewodu, przez jednowymiarowe równanie dyfuzyjne. Dla odróżnienia od dyfuzji, nazwał to zjawisko dyspersją.

Analiza Taylora wychodzi od równania adwekcyjno-dyfuzyjnego I.2.6, które przy uwzględnieniu równania ciągłości I.2.8 oraz założeń związanych z symetrią osiową analizowanego układu, można zredukować do postaci:

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} + \langle u \rangle \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial x} = \varepsilon_t \frac{\partial^2 \langle c \rangle}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot \varepsilon_t \frac{\partial \langle c \rangle}{\partial r} \right) \quad \text{I.3.1.}$$

Ponieważ z punktu widzenia obserwatora interesujące są jedynie średnie wartości stężenia substancji i średnia wartość przepływu, więc wielkości te można rozwinąć na wartości średnie — \bar{c} i \bar{u} oraz ich odchylenia — c' i u' , a następnie szukać rozwiązania dla \bar{c} zdefiniowanego jako średnie stężenie dla przekroju poprzecznego:

$$\bar{c} = \frac{2}{R^2} \int_0^R \langle c \rangle r dr \quad \text{I.3.2.}$$

Analogicznie można zdefiniować \bar{u} jako:

$$\bar{u} = \frac{2}{R^2} \int_0^R \langle u \rangle r dr \quad \text{I.3.3,}$$

co, jak łatwo pokazać, równa się średniej objętości przepływu w jednostce czasu i jednostce przekroju poprzecznego rury.

Po zmianie układu współrzędnych na układ poruszający się wzdłuż rury ze średnią prędkością przepływu:

$$\begin{aligned} x' &= x - \bar{u}t \\ t' &= t \end{aligned} \quad \text{I.3.4}$$

¹¹ G. I. Taylor *Dispersion of solute matter in solvent flowing slowly through a tube*, "Proceedings of The Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences", vol. 219, 1953, pp. 186–203.

¹² G. I. Taylor *Diffusion by Continuous Movements*, "Proceedings of The London Mathematical Society", vol. 20, 1921, pp. 196–212.

równanie I.3.1 przybierze postać:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{c} + c') + u' \frac{\partial}{\partial x'}(\bar{c} + c') = \frac{\partial}{\partial x'} \left(\varepsilon_t \frac{\partial}{\partial x'}(\bar{c} + c') \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon_t \frac{\partial c'}{\partial r} \right) \quad \text{I.3.5.}$$

Taylor zasugerował pominięcie członu dyfuzji molekularnej wzdłuż osi rurociągu, jako zjawiska dużo mniejszego rzędu niż zjawisko dyspersji. Założył również, że po odpowiednio długim czasie przepływu radialne zmiany stężenia będą małe w porównaniu z wartością średnią, a zatem w lewej części powyższego równania można pominąć człon odchylenia c' . Jednakże najbardziej idącym uproszczeniem Taylora było założenie, że po dostatecznie długim czasie ustali się równowaga pomiędzy tworzeniem się, wskutek zmiennego profilu prędkości, poprzecznego gradientu stężenia a dyssypacją tego gradientu wskutek dyfuzji i w efekcie zmiany czasowe uśrednionego stężenia będą małe w porównaniu z członami adwekcji i dyfuzji poprzecznej. Założenia te redukują powyższe równanie do prostego bilansu:

$$u' \frac{\partial \bar{c}}{\partial x'} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \varepsilon_t \frac{\partial c'}{\partial r} \right) \quad \text{I.3.6.}$$

Ponieważ z definicji \bar{c} jest niezależne od r , więc powyższe równanie, po przekształceniu, dwukrotnym scałkowaniu i uwzględnieniu faktu, że, ze względu na symetrię profilu prędkości, w punkcie $r=0$ $\partial c'/\partial r = 0$, prowadzi do rozwiązania:

$$c' = \frac{\partial \bar{c}}{\partial x'} \int_0^r \frac{1}{r \varepsilon_t} \left[\int_0^r u' r dr \right] dr + c'_{r=0} \quad \text{I.3.7.}$$

Uśredniony po przekroju poprzecznym iloczyn $u'c'$ ma wymiar strumienia masy, a zatem przez analogię do I.1.1 czy I.2.5 można napisać, że:

$$\overline{u'c'} \equiv \frac{2}{R^2} \int_0^R u'c' \cdot r dr = -D \frac{\partial \bar{c}}{\partial x'} \quad \text{I.3.8,}$$

gdzie D jest poszukiwanym przez nas współczynnikiem dyspersji.

Ponieważ $c'_{r=0}$ jest wielkością stałą, więc uśredniona po przekroju poprzecznym wartość iloczynu $u'c'_{r=0}$ jest ze względu na definicję u' równa zero. Zatem z porównania I.3.7 i I.3.8 otrzymujemy:

$$\frac{2}{R^2} \int_0^R u' r \frac{\partial \bar{c}}{\partial x'} \left[\int_0^r \frac{1}{r \varepsilon_t} \left[\int_0^r u' r dr \right] dr \right] dr = -D \frac{\partial \bar{c}}{\partial x'} \quad \text{I.3.9.}$$

Ponieważ \bar{c} jest zależne jedynie od współrzędnej przestrzennej x' , więc pochodna $\partial \bar{c}/\partial x'$ jest stałą ze względu na całkowanie względem zmiennej r , a to prowadzi do redukcji równania I.3.9 do postaci pozwalającej na zdefiniowanie współczynnika dyspersji D jako:

$$D = -\frac{2}{R^2} \int_0^R u'r \left[\int_0^r \frac{1}{r\varepsilon_t} \left[\int_0^r u'r dr \right] dr \right] dr \quad \text{I.3.10.}$$

Biorąc pod uwagę I.2.20 i zakładając analogię Reynoldsa można stwierdzić, że do określenia wartości współczynnika dyspersji wystarczy jedynie znajomość kształtu profilu prędkości przepływu strumienia płynu w przewodzie.

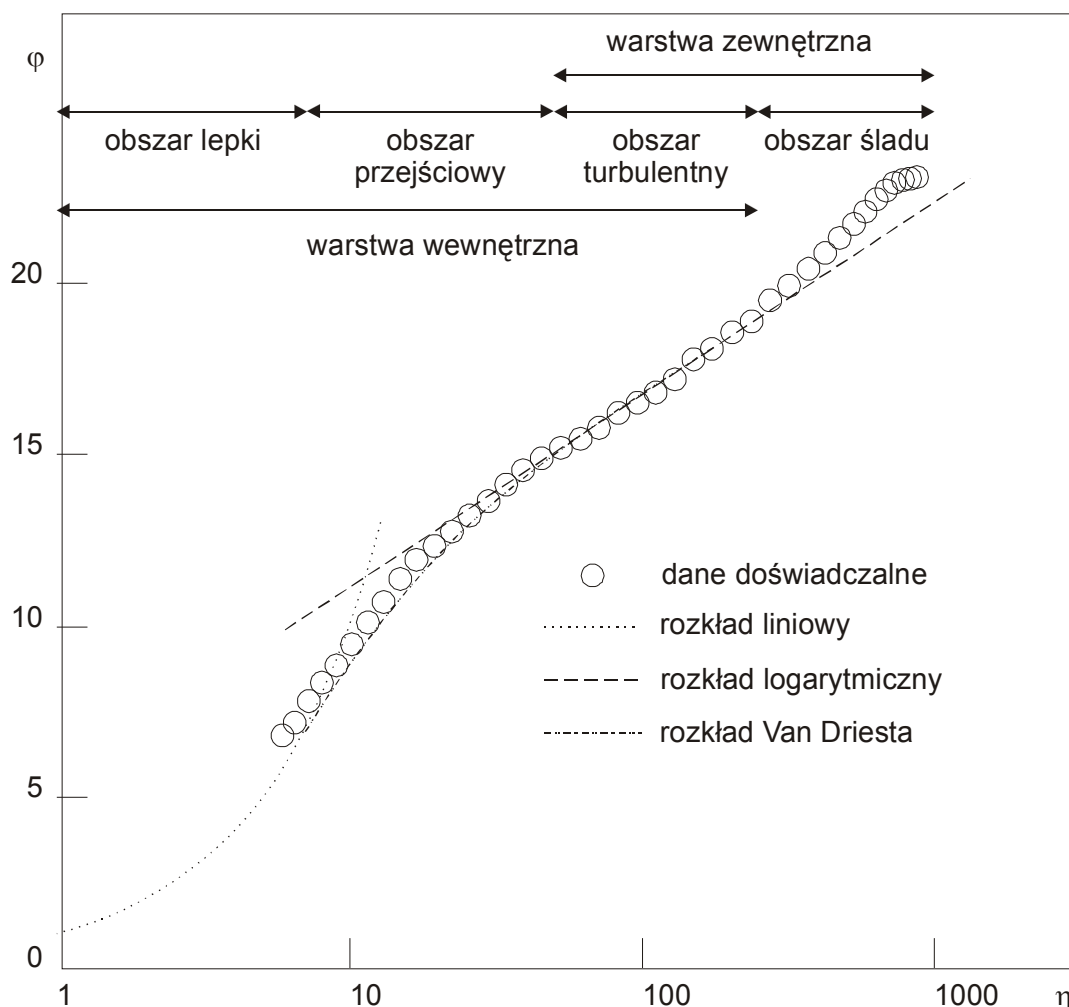
I.4. Profil prędkości przepływu w rurociągu

Opis profilu prędkości przepływu turbulentnego nie jest prosty, gdyż strumień w pobliżu opływanej ściany można podzielić, ze względu na dominujące w nich siły, na kilka warstw. Podstawowy podział, to warstwa wewnętrzna (przylegająca do ściany), w której odczuwany jest efekt działania sił tarcia, pochodzących od opływanej ściany oraz warstwa zewnętrzna, gdzie strumień płynu jest swobodny. Ze względu na odwróconą geometrię przepływu w przewodzie zamkniętym, będziemy zamiennie używać określeń: *warstwa przyścienna* i *rdzeń przepływu (obszar przyosiowy)*.

Warstwy te częściowo przekrywają się i właśnie w tej strefie dominującą rolę pełnią siły lepkości turbulentnej. W literaturze polskiej obszar ten nosi nazwę *obszaru logarytmicznego*, ze względu na powszechnie przyjmowany logarytmiczny kształt profilu prędkości w tym obszarze. Ponieważ jednak profil taki ostatnimi czasy jest kwestionowany, więc używać będziemy zamiennie określenia *obszar turbulentny* lub kalki językowej z literatury angielskiej — *obszar nakładania się warstw (overlap region)*. Zazwyczaj przyjmuje się, że obszar ten rozciąga się od $\eta > 30 \sim 70$ do $\xi < 0,1 \sim 0,2$.

Pomiędzy obszarem turbulentnym a warstwą zewnętrzną występuje tzw. *obszar śladu*, nazwany tak ze względu na podobieństwo zmian prędkości w nim do zmian w śladzie aerodynamicznym. W przewodzie zamkniętym obszar ten sięga właściwie do osi przepływu, gdyż w takim układzie trudno mówić o jakiejś warstwie zewnętrznej (nie istnieje profil swobodnego przepływu — profil płaski).

W warstwie wewnętrznej, w pobliżu ściany dominują siły lepkości i ten obszar nazywamy *obszarem lepkim* lub też *podwarstwą laminarną* (ze względu na charakter przepływu w tej warstwie), która musi istnieć zawsze, jednakże jej grubość zmniejsza się wraz ze wzrostem liczby Reynoldsa. Pozostała część warstwy wewnętrznej, to *obszar przejściowy* pomiędzy obszarem lepkim a obszarem turbulentnym, w którym obserwujemy wyraźne tłumienie przez siły lepkości (w miarę zbliżania się do obszaru lepkiego) struktur wirowych, odpowiedzialnych za zjawiska turbulentne. Przykład profilu prędkości, wykreślonego na podstawie danych doświadczalnych, z zaznaczonymi obszarami, przedstawia Rys. 4.



Rys. 4. Przykład profilu prędkości z zaznaczeniem jego obszarów i przebiegu funkcji opisujących jego kształt. Źródło danych: http://www.princeton.edu/~gasdyn/Superpipe_data/3.1577E+04.txt

W obszarze lepkiem naprężenie styczne podlega prawu Newtona:

$$\tau = \mu \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} \quad \text{I.4.1.}$$

Jeżeli przyjmiemy, że wielkość τ jest stała i równa τ_0 w wyniku otrzymujemy prędkość rosnącą liniowo od zera przy ścianie przewodu do wartości u_{δ_1} w odległości δ_1 od ściany, dokąd sięga ten obszar. W postaci bezwymiarowej zależność ta wygląda następująco:

$$\varphi = \eta \quad \text{I.4.2.}$$

Z pomiarów laboratoryjnych wynika, że obszar lepki sięga do wartości $\eta \approx 11,63$, co daje wartość $u_{\delta_1} \approx 11,63u_*$.

W obszarze turbulentnym, gdzie naprężenie turbulentne gra dominującą rolę, można pominąć naprężenie lepkie, a wtedy kształt profilu prędkości zależał będzie od sposobu domknięcia równania Reynoldsa. W tak prostym układzie, jakim jest przepływ w prze-

wodzie zamkniętym o symetrii osiowej, wystarczającym modelem domykającym równanie Reynoldsa jest skalarny, zerorównaniowy, model drogi mieszania Prandtla¹³.

Model drogi mieszania Prandtla opiera się, tak jak hipoteza lepkości turbulentnej Boussineqa, na analogii do kinetycznej teorii gazów. Prandtl założył, że element płynu, poruszając się wskutek turbulencji w kierunku prostopadłym do opływanej ściany, będzie przynosił do swego nowego miejsca położenia pęd skierowany wzdłuż przepływu strumienia. Kluczowe dla swego modelu pojęcie drogi mieszania l_m zdefiniował on jako odległość, na którą element płynu może przemieszczać się nie powodując zauważalnej zmiany pędu. Jest to więc odległość analogiczna do średniej drogi swobodnej w kinetycznej teorii gazów. Jeśli więc element objętości płynu dV przemieści się wskutek prostopadłej do ściany fluktuacji \tilde{u}_y z położenia y w położenie $y+l_m$, to spowoduje zmianę momentu wzdłuż kierunku przepływu zmianę pędu $\rho\tilde{u}_x dV$ równą:

$$\rho\tilde{u}_x dV = -\rho(\langle u \rangle(y) - \langle u \rangle(y+l_m))dV \quad 1.4.3,$$

co w granicy daje wyrażenie

$$\tilde{u}_x = -l_m \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} \quad 1.4.4,$$

a ponieważ fluktuacje prędkości spowodowane są strukturami wirowymi, w których prędkości styczne są takie same we wszystkich kierunkach, to w rezultacie otrzymujemy:

$$-\rho \langle \tilde{u}\tilde{u} \rangle = \tau_t = l_m^2 \left(\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} \right)^2 \quad 1.4.5.$$

Kluczowa w tym modelu wielkość l_m została określona dla $Re \sim 10^5$ przez Nikuradzego¹⁴, na podstawie eksperymentów pomiaru rozkładu prędkości przepływu w rurach gładkich o promieniu R , zależnością:

$$\frac{l_m}{R} = 0,14 - 0,08 \left(1 - \frac{y}{R} \right)^2 - 0,06 \left(1 - \frac{y}{R} \right)^4 \quad 1.4.6,$$

co przy redukcji do wyrazów tylko liniowych prowadzi do zależności:

$$l_m = \kappa y \quad 1.4.7,$$

w której stała κ , nosząca nazwę stałej von Kármána, w tym przypadku ma wartość równą 0,40. Obecnie jednak większość badaczy przyjmuje dla niej wartość 0,41.

Jeżeli założymy, że w pobliżu ściany przewodu, gdzie następuje zasadnicza zmiana profilu prędkości w przepływie turbulentnym, naprężenie styczne jest stałe i równe τ_0 , to

¹³ L. Prandtl *Über die Ausgebildete Turbulenz*, „Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik”, vol. 5, no. 3, 1925, pp. 136–139.

¹⁴ J. Nikuradse *Gesetzmäßigkeiten der turbulenten Strömung in glatten Röhren*, VDI Forschungsheft No. 356, VDI-Verlag, Berlin 1932.

na podstawie zależności I.4.5 i I.4.7 możemy wywnioskować, że profil prędkości w postaci bezwymiarowej będzie opisywany funkcją logarytmiczną:

$$\varphi = \frac{1}{\kappa} \ln \eta + C \quad \text{I.4.8.}$$

Stałą C wyznacza się doświadczalnie i dla rur gładkich wynosi ona w przybliżeniu 5,5, natomiast dla rur chropowatych wyznacza się ją z pomiaru prędkości u_k w odległości k od ściany rury, gdzie parametr k jest tak zwaną *chropowatością zastępczą*. Z analizy wymiarowej wynika, że u_k wyrażona jako wielokrotność u_* musi być funkcją wielkości $\eta_k = ku_*/\nu$. Na podstawie badań J. Nikuradzego¹⁵, przeprowadzonych na rurach ze sztucznie wytworzoną chropowatością, można wyróżnić trzy zakresy tej funkcji. Dla wartości $\eta_k < 3$, co odpowiada $k < \frac{1}{4}\delta_1$, zależność ta wyraża się wzorem:

$$\Phi(\eta_k) = \frac{u_k}{u_*} = \frac{1}{\kappa} \ln \eta_k + 5,5 \quad \text{I.4.9,}$$

co oznacza, że aż do odległości $y = k$ zachowany jest profil prędkości właściwy dla rur gładkich. Wynika stąd, że w tym zakresie wartości chropowatość nie wpływa na profil przepływu i powierzchnia rury jest hydraulicznie gładka. Dla wartości $\eta_k > 60$, co odpowiada $k > 6\delta_1$, wartość u_k jest stała i wynosi $8,48u_*$. Obszar wartości $\frac{1}{4}\delta_1 < k < 6\delta_1$ jest obszarem przejściowym, o trudnej do uchwycenia zależności funkcyjnej. J. Guo w dyskusji¹⁶ do artykułu S. Wu i N. Rajaratnama¹⁷ zaproponował następujące dopasowanie do danych Nikuradzego:

$$\Phi(\eta_k) = \frac{5,75 \log \eta_k - 3,25}{\exp\left[\log^3(1 + \eta_k^{0,88})\right]} + 8,5 \quad \text{I.4.10.}$$

G. Pezzinga¹⁸, dla tego samego zbioru danych zaproponował natomiast funkcję:

$$\Phi(\eta_k) = (5,5 + 2,5 \ln \eta_k) \exp\left(-0,137(\ln \eta_k)^{2,29}\right) + 8,5 \left(1 - \exp\left(-0,137(\ln \eta_k)^{2,29}\right)\right) \quad \text{I.4.11.}$$

Należy jeszcze dodać, że dla rur o chropowatości naturalnej wyniki pomiarów są identyczne jedynie dla obszaru wartości $k > 6\delta_1$. Dla niższych wartości zależność u_k/u_*

¹⁵ J. Nikuradse *Strömungsgesetze in rauhen Röhren*, VDI Forschungsheft No. 361, VDI-Verlag, Berlin 1933.

¹⁶ J. Guo *Discussion. A simple method for measuring shear stress on rough boundaries*, "Journal of Hydraulic Research", vol. 39, no. 4, 2001, pp. 445–446.

¹⁷ S. Wu and N. Rajaratnam *A simple method for measuring shear stress on rough boundaries*, "Journal of Hydraulic Research", vol. 38, no. 5, 2000, pp. 399–400.

¹⁸ G. Pezzinga *Quasi-2D Model for Unsteady Flow in Pipe Networks*, "Journal of Hydraulic Engineering", vol. 125, no. 7, July 1999, pp. 676–685.

od η_k asymptotycznie zbliża się do I.4.9. G. Pezzinga, we wspomnianej już publikacji, proponuje następujące dopasowanie dla tego typu danych:

$$\Phi(\eta_k) = 8,25 - 2,5 \ln(1 + 3,32/\eta_k) \quad \text{I.4.12.}$$

Wartość stałej C w równaniu I.4.8 z punktu widzenia potrzeb tej pracy nie jest jednak istotna, gdyż interesuje nas, jak to widać z równania I.3.10, jedynie część zmienna uśrednionego w czasie profilu prędkości. Jak łatwo to pokazać, w obu przypadkach (rur gładkich i chropowatych) jej kształt opisuje funkcja:

$$u' = \langle u \rangle - \bar{u} = \frac{u_*}{\kappa} \left(\ln \xi + \frac{3}{2} \right) \quad \text{I.4.13.}$$

W tym miejscu konieczne należy nadmienić, że istnieje dosyć liczna grupa naukowców kwestionująca logarytmiczny kształt profilu prędkości w obszarze turbulentnym. Głównie jest to grupa skupiona wokół G. I. Barenblatta i A. J. Chorina¹⁹. Grupa ta twierdzi, że profil logarytmiczny wynika z błędnej interpretacji danych pomiarowych, natomiast właściwy dla tego obszaru jest profil potęgowy, którego parametry kształtu zależne są od liczby Reynoldsa:

$$\varphi = \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \ln \text{Re} + \frac{5}{2} \right) \cdot \eta^{\frac{3}{2} \ln \text{Re}} \quad \text{I.4.14,}$$

natomiast niezależny od liczby Reynoldsa profil logarytmiczny jest jedynie obwiednią rodziny krzywych wyznaczanych przez I.4.14, o postaci:

$$\varphi = \frac{\sqrt{3}e}{2} \ln \eta + \frac{5e}{2} \quad \text{I.4.15.}$$

Wiąże się to oczywiście z krytyką modelu Prandtla–von Kármána, na gruncie którego otrzymujemy właśnie w rezultacie profil logarytmiczny. Autorzy krytyki proponują więc własną teorię turbulencji²⁰.

¹⁹ Między innymi: G. I. Barenblatt, A. J. Chorin *Small viscosity asymptotics for the inertial range of local structure and for the wall region of wall-bounded turbulent shear flow*, "Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America", vol. 93, no. 13, June 25 1996, pp. 6749–6752; G. I. Barenblatt, A. J. Chorin, and V. M. Prostokishin *Scaling laws for fully developed turbulent flow in pipes: Discussion of experimental data*, "Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America", vol. 94, no. 3, February 4 1997, pp. 773–776; G. I. Barenblatt, A. J. Chorin, and V. M. Prostokishin *Scaling Laws for Fully Developed Turbulent Flow in Pipes*, "Applied Mechanics Reviews", vol. 50, no. 7, 1997, pp. 413–429.

²⁰ G. I. Barenblatt, A. J. Chorin *A new formulation of the near-equilibrium theory of turbulence*, "ESAIM: Proceedings", vol. 7, 1999, pp. 24–35. Third International Workshop on Vortex. Flows and Related Numerical Methods [online]. Tryb dostępu: <http://www.edpsciences.org/articlesproc/Vol.7/>.

Weryfikacji obu modeli (logarytmicznego i potęgowego), na podstawie szerokiego zbioru danych pomiarowych z sześciu niezależnych źródeł, podjęli się ostatnio M. Buschmann i M. Gad-el-Hak²¹. Autorzy doszli do następujących wniosków: 1) niewielka wewnętrzna strefa obszaru turbulentnego (tuż przy obszarze przejściowym) nie może być opisywana profilem potęgowym (tzn. jest czysto logarytmiczna), można zaś za pomocą profilu potęgowego opisywać wewnętrzną część obszaru śladu (w pobliżu obszaru turbulentnego); pozostałą część obszaru turbulentnego można z powodzeniem opisywać za pomocą obu profili; 2) dane doświadczalne nie wskazują w sposób istotny statystycznie na żaden z modeli we wspólnym obszarze stosowania obu; 3) nie istnieje druga strefa profilu potęgowego w obszarze śladu, sugerowana dla profilu swobodnego przepływu nad powierzchnią płaską przez Barenblatta i innych²²; w tym obszarze o wiele lepsze dopasowanie do danych pomiarowych daje funkcja śladu.

Dla obszaru przejściowego E. Van Driest²³ zaproponował poprawione wyrażenie na naprężenie turbulentne, uwzględniające czynnik tłumiący struktury wirowe:

$$\tau_t = \rho \kappa^2 y^2 (1 - e^{-\eta/A})^2 \left(\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} \right)^2 \quad \text{I.4.16.}$$

Stała A jest dobierana eksperymentalnie i dla rur gładkich ma wartość około 26. W obszarze tym nie można pominąć naprężenia lepkiego, ostatecznie więc suma naprężeń wyraża się w tym obszarze poprzez:

$$\tau = \left[\mu + \rho \kappa^2 y^2 (1 - e^{-\eta/A})^2 \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} \right] \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} \quad \text{I.4.17.}$$

Jeżeli również w tym obszarze założymy, że naprężenie jest stałe, to w postaci bezwymiarowej otrzymamy następującą zależność:

$$\kappa^2 \eta^2 (1 - e^{-\eta/A})^2 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \right)^2 + \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} - 1 = 0 \quad \text{I.4.18.}$$

Jest to równanie kwadratowe ze względu na $\partial \varphi / \partial \eta$, z dwoma pierwiastkami, z których tylko jeden, dodatni, ma sens fizyczny — φ musi być funkcją rosnącą η , gdyż prędkość rośnie w miarę oddalania się od ściany. Po scałkowaniu tego pierwiastka otrzymujemy rozwiązanie:

²¹ M. H. Buschmann, and M. Gad-el-Hak *Debate Concerning the Mean-Velocity Profile of a Turbulent Boundary Layer*, "AIAA Journal", vol. 41, no. 4, April 2003, pp. 565–572.

²² G. I. Barenblatt, A. J. Chorin, O. H. Hald, and V. M. Prostokischin *Structure of zero-pressure-gradient turbulent boundary layer*, "Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America", vol. 94, no. 15, July 22 1997, pp. 7817–7819.

²³ E. R. Van Driest *On turbulent flow near a wall*, "Journal of the Aeronautical Sciences", vol. 23, no. 11, 1956, pp. 1007–1011.

$$\varphi = \int_0^{\eta} \frac{2d\eta}{1 + \sqrt{1 + 4\kappa^2\eta^2(1 - \exp(-\eta/A))}} \quad \text{I.4.19.}$$

Jak łatwo pokazać, całka ta w granicy małych η daje funkcję liniową, a w granicy dużych η — zależność logarytmiczną. Spełnia więc doskonale postulat „sklejenia” dwu obszarów — lepkiego i turbulentnego. Propozycja Van Driesta jest rozszerzeniem modelu Prandtla na całą warstwę wewnętrzną i doskonale spełnia w prostszych przypadkach swoje zadanie.

Innym rozwiązaniem, czysto empirycznym, jest propozycja Spaldinga²⁴, oparta na idei asymptotycznego połączenia I.4.2 i I.4.8, dość dobrze przybliżająca kształt profilu w tym obszarze:

$$\eta = \varphi + e^{-\kappa C} \left[e^{\kappa\varphi} - \sum_{n=0}^4 \frac{(\kappa\varphi)^n}{n!} \right] \quad \text{I.4.20.}$$

Jak widać z Rys. 4, w dalszej odległości od ściany widoczne jest pewne odchylenie od profilu logarytmicznego. Jest to obszar śladu i jego profil opisywany jest przez poprawkę do profilu logarytmicznego, tzw. *funkcję śladu*:

$$W(\xi) = \frac{2\Pi}{\kappa} \sin^2 \frac{\pi\xi}{2} \quad \text{I.4.21.}$$

Pojęcie obszaru śladu i kształt funkcji wprowadził D. Coles²⁵. Parametr Π nazywany jest mocą śladu (*wake strength*) i zależy od rozkładu prędkości na granicy obszaru swobodnego opływu. Ponieważ w przewodzie zamkniętym takiego obszaru nie ma, więc jego charakter jest trochę niejasny. Biorąc pod uwagę bilans sił pochodzących od gradientu ciśnienia i naprężeń stycznych, można wnioskować, że jest on związany właśnie z gradientem ciśnienia.

Tak więc, pomijając cienkie obszary, lepki i przejściowy, suma funkcji I.4.8 i I.4.21 powinna w pełni opisywać profil prędkości przepływu w rurociągu. Profil taki nazywamy *logarytmiczno-śladowym*. Jednakże już sama analiza warunków brzegowych pokazuje, że profil ten nie odpowiada rzeczywistości fizycznej: 1) w pobliżu ściany prędkość powinna zmierzać do zera, a w tym przypadku zmierza do $-\infty$; 2) w osi rury, ze względu na symetrię problemu, pochodna prędkości powinna być równa zero, a w tym przypadku wręcz nie istnieje pochodna ciągła (funkcja opisująca profil nie jest w tym miejscu różniczkowalna — nie jest „gładka”).

Warunek pierwszy jest złamany po prostu wskutek uproszczenia i naprawia go przyjęcie, zamiast I.4.8, funkcji I.4.19 lub I.4.20.

²⁴ D. B. Spalding *A Single Formula for the Law of the Wall*, “Journal of Applied Mechanics”, vol. 28, no. 3, 1961, pp. 455–458.

²⁵ D. E. Coles *The law of the wake in the turbulent boundary layer*, “Journal of Fluid Mechanics”, vol. 1, no. 3, 1956, pp. 191–226.

Warunek drugi można zapewnić dodając do profilu logarytmiczno-śladowego człon korygujący. W 1998 roku J. Guo²⁶, rozwijając taki właśnie profil w szereg wokół punktu $\xi = 1$ i przyrównując jego pochodną do zera, zaproponował człon korygujący w postaci:

$$B(\xi) = \left[\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{u_*} \frac{d\langle u \rangle}{d\xi} \Big|_{\xi=1} \right] (1 - \xi) \quad \text{I.4.22.}$$

i taką konstrukcję nazwał *zmodyfikowanym profilem logarytmiczno-śladowym (modified log-wake law)*. Jednakże pochodna członu I.4.22 jest wartością stałą i w pobliżu ścian wprowadza dodatkowe naprężenie styczne, dlatego ostatecznie J. Guo i P. Julien²⁷ zaproponowali inną jego postać:

$$B(\xi) = -\frac{1}{\kappa} \frac{\xi^3}{3} \quad \text{I.4.23.}$$

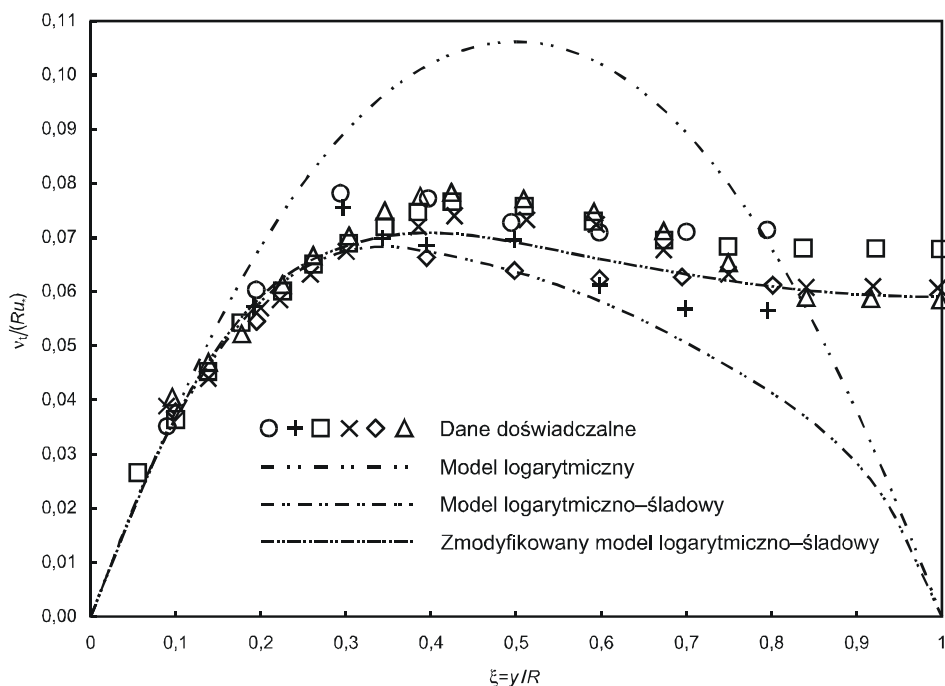
W pracy tej autorzy przyjęli arbitralnie wartość współczynnika $\kappa = 2/(\sqrt{3}e) \approx 0,425$ i założyli, że $\Pi = \kappa$. Taka wartość współczynnika κ pochodzi z zaproponowanej przez Barenblatta i innych obwiedni I.4.15 dla rodziny profili potęgowych I.4.14. W świetle przedstawionej powyżej dyskusji, jaka się toczy na temat wartości profili logarytmicznego i potęgowego, dla celów tej pracy profil przepływu został przyjęty w postaci ogólnej, bez przesądzania o wartości współczynników κ oraz Π :

$$\varphi = \frac{1}{\kappa} \ln \eta + C + \frac{2\Pi}{\kappa} \sin^2 \frac{\pi\xi}{2} - \frac{1}{\kappa} \frac{\xi^3}{3} \quad \text{I.4.24.}$$

Warto w tym miejscu dodać, że spośród profili czysto logarytmicznego (często przyjmowanego w obliczeniach za obowiązujący na całym przekroju poprzecznym strumienia), logarytmiczno-śladowego i zmodyfikowanego logarytmiczno-śladowego, tylko ten ostatni oddaje dobrze również pomiary współczynnika lepkości turbulentnej, co widać na Rys. 5. Przebieg funkcji opisującej v_t otrzymujemy bezpośrednio ze związku I.2.20 i odpowiednich modeli profilu prędkości.

²⁶ J. Guo *Turbulent Velocity Profiles in Clear Water and Sediment-Laden Flows*, PhD Dissertation, Department of Civil Engineering, Colorado State University, Fort Collins 1998.

²⁷ J. Guo, P. Y. Julien *Modified log-wake law for turbulent flow in smooth pipes*, "Journal of Hydraulic Research", vol. 41, no. 5, 2003, pp. 493–501.



Rys. 5. Porównanie współczynnika lepkości turbulentnej dla różnych modeli profilu prędkości z danymi doświadczalnymi. Źródło danych doświadczalnych: J. Guo, P. Y. Julien, op cit.

1.5. Zmiany stężenia wskutek aktywności chemicznej zanieczyszczenia

W dotychczasowych rozważaniach pomijaliśmy człon ostatni równania 1.1.9, odpowiedzialny za zmiany stężenia zanieczyszczenia nie mające źródła w mechanice przepływu.

Podstawową miarą opisującą kinetykę reakcji chemicznej jest *szybkość reakcji chemicznej*, którą można określić jako stosunek dowolnej miary zużycia substratów do czasu, w którym to zużycie zachodzi. Najczęściej jako miarę szybkości reakcji ν przyjmuje się stosunek ubytku stężenia substratów ($-dc$) do czasu (dt), co w postaci równania wyraża się zależnością:

$$\nu = -\frac{dc}{dt} \tag{1.5.1}$$

Szybkość reakcji chemicznej zależy zarówno od stężenia reagentów jak i temperatury reakcji. Jeżeli równanie stechiometryczne reakcji chemicznej wyrazimy w ogólnej postaci:



gdzie n_A , n_B , itd. są współczynnikami stechiometrycznymi równania, to równanie kinetyczne można zapisać w postaci:

$$\nu = a \cdot c_A^m \cdot c_B^n \cdot \dots \tag{1.5.3}$$

gdzie c_A , c_B , itd. są odpowiednio stężeniami reagentów A, B, itd., natomiast wykładniki potęgowe noszą nazwę *rzędów reakcji* względem odpowiednich reagentów. Suma wy-

kładników stanowi o ogólnym rzędzie danej reakcji chemicznej. Występująca we wzorze wielkość a pozostaje stała w danej temperaturze i nosi nazwę *stałej reakcji chemicznej*, a jej zależność od temperatury jest opisywana przez teorię kinetyki reakcji chemicznej.

I.5.1. Stała reakcji chemicznej

Podstawy teorii kinetyki reakcji chemicznych stworzył Svante August Arrhenius, który już w roku 1889 podał zależność stałej reakcji chemicznej od temperatury w postaci dwupunktowej²⁸:

$$a_{T_1} = a_{T_0} \exp\left[\frac{q(T_1 - T_0)}{2T_1T_0}\right] \quad \text{I.5.4,}$$

gdzie a_{T_1} i a_{T_0} są stałymi szybkości reakcji w temperaturach odpowiednio T_1 i T_0 , wyrażonych w skali bezwzględnej, natomiast wielkość q odpowiada wydatkowi cieplnemu (wyrażonemu w kaloriach) potrzebnemu do utworzenia molekuly „aktywnej”, zdolnej do reakcji. Było to pierwsze sformułowanie idei, która zaowocowała później *teorią zderzeń aktywnych* powstałą na gruncie kinetycznej teorii gazów.

W świetle tej teorii reakcje mogą zachodzić tylko w czasie zderzeń między molekułami substratów. Aby w trakcie zderzeń mogły zajść reakcje, molekuly muszą mieć pewną minimalną energię, nazywaną *energiją aktywacji*. Liczba molekul posiadających przynajmniej taką energię rośnie wykładniczo wraz ze wzrostem temperatury, co powoduje wykładniczy wzrost stałej szybkości reakcji. Zależność ta wyraża się wzorem Arrheniusa:

$$a = A_0 \exp(-E_a/RT) \quad \text{I.5.5,}$$

Stała A_0 jest charakterystyczna dla danej reakcji i jest związana z prawdopodobieństwem zajścia zderzenia. Teoria ta dość dobrze opisuje prostsze reakcje chemiczne, zwłaszcza zachodzące w fazie gazowej, jednakże w innych przypadkach nie opisuje ściśle mechanizmu reakcji. Problem ten rozwiązuje *teoria kompleksu aktywnego*, zwana też teorią stanu przejściowego, którą sformułowali w 1935 roku na gruncie termodynamiki Henry Eyring²⁹ i Michael (Mihály) Polányi³⁰. Teoria ta zakłada, że w trakcie reakcji chemicznej substraty przechodzą przez niestabilny stan pośredni, który zderzające się molekuly substratów tworzą pod wpływem energii zderzenia. Jeśli energia ta przewyższa energię progową, to tworzy się tak zwany *kompleks aktywny* lub *stan pośredni*, którego energia jest równa różnicy entalpii substratów i kompleksu i nosi nazwę *entalpii*

²⁸ S. Arrhenius *Über die Reaktionsgeschwindigkeit bei der Inversion von Rohrzucker durch Säuren*, „Zeitschrift für Physikalische Chemie”, vol. 4, 1889, pp. 226–248.

²⁹ H. Eyring *The Activated Complex in Chemical Reactions*, „Journal of Chemical Physics”, vol. 3, 1935, pp. 107–115.

³⁰ M. G. Evans, M. Polanyi *Some Applications of the Transition State Method to the Calculation of Reaction Velocities, Especially in Solution*, „Transactions of the Faraday Society”, vol. 31, 1935, p. 875.

aktywacji. Kompleks ten natychmiast rozpada się, tworząc trwalsze produkty. W ramach tej teorii wyrażenie na stałą szybkości reakcji ma postać równania Eyringa:

$$a = \frac{k_B T}{h} \cdot \exp\left(\frac{\Delta S^\ddagger}{R}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H^\ddagger}{RT}\right) \quad 1.5.6,$$

w którym entalpia aktywacji ΔH^\ddagger równa się różnicy entalpii kompleksu aktywnego i sumarycznej entalpii substratów, a entropia aktywacji ΔS^\ddagger równa jest różnicy entropii kompleksu aktywnego i sumarycznej entropii substratów.

Równanie Eyringa może być stosowane zarówno do reakcji w fazie gazowej, jak i reakcji w fazach skondensowanych czy mieszanych — wszędzie tam, gdzie prosty model zderzeniowy nie jest zbyt przydatny. Entalpia aktywacji i entropia aktywacji są dla danej reakcji ustalone, tak więc stała szybkości reakcji dla danej reakcji jest funkcją jedynie temperatury i jest jedynym elementem równania kinetycznego zależnym od tej zmiennej.

Jednak w praktyce modelowania przepływu substancji reaktywnej przez sieć wodociagową raczej trudne wydaje się uwzględnienie zależności szybkości reakcji od temperatury. Jest to związane z tym, iż model hydrauliczny takiej zmiennej nie bierze pod uwagę, co widać w fakcie przyjmowania w symulatorach hydraulicznych stałej wartości współczynnika lepkości kinematycznej wody. Ścisłej mówiąc, w symulatorach hydraulicznych dla wodociągu przyjmuje się stałą temperaturę wody i zakłada się, że występujące różnice sięgają co najwyżej kilku stopni Celsjusza. Uwzględnienie zależności szybkości reakcji od temperatury wymagałoby zatem dodatkowej symulacji (w ramach modelu jakości) temperatury wody w sieci wodociagowej. Teoretycznie jest to możliwe, symulacja taka wymagałaby jednak określenia przynajmniej profili czasowych temperatury wody wpływającej do sieci we wszystkich punktach zasilania, współczynników przewodnictwa cieplnego dla wszystkich rurociągów sieci i temperatury otoczenia rurociągów wzdłuż całej sieci. O ile dwa pierwsze elementy są łatwe do spełnienia (pierwszy wymaga pomiarów lub symulacji w niewielu punktach sieci, zaś drugi wiąże się ściśle z parametrami fizycznymi i geometrycznymi rurociągów, a zatem jest łatwy do obliczenia), to trzeci wymagałby skomplikowanych symulacji lub też ciągłych pomiarów temperatury wzdłuż całej sieci wodociagowej, co mijają się z celem samej symulacji, gdyż łatwiej już byłoby dokonywać ciągłych pomiarów stężeń zanieczyszczeń w sieci. Tak więc znajomość zależności stałej szybkości reakcji od temperatury pozwala w praktyce jedynie na oszacowanie błędu symulacji zmian stężenia reagentów (czy też produktów) wynikającego z założenia pewnej średniej temperatury wody w całej sieci wodociagowej. Należy jednak podkreślić, że nawet takie oszacowanie byłoby korzystne, zwłaszcza w przypadku reakcji czułych na zmiany temperatury.

I.5.2. Rzędowość reakcji

Ze względu na zależność szybkości reakcji od stężenia substratów zostało wprowadzone pojęcie *rzędowości reakcji chemicznej*. Jeśli mamy do czynienia z reakcjami elementarnymi, to udaje się powiązać rzędowość reakcji z jej schematem stechiometrycznym. Zazwyczaj są to reakcje pierwszego lub drugiego rzędu. Reakcje elementarne rzędów wyższych zdarzają się rzadko, ze względu na bardzo małe prawdopodobieństwo zajścia takiej reakcji. Poniższa tabela przedstawia schematy najprostszych reakcji elementarnych, wraz z odpowiadającymi im równaniami kinetycznymi.

Tab. 1. Porównanie równań kinetycznych dla kilku podstawowych schematów stechiometrycznych najprostszych reakcji chemicznych.

Schemat stechiometryczny	Równanie kinetyczne	
$A \xrightarrow{a} P$	$v = -ac_A$	$v_A = v$
$2A \xrightarrow{a} P$	$v = -ac_A^2$	$v_A = 2v$
$A + B \xrightarrow{a} P$	$v = -ac_Ac_B$	$v_A = v, v_B = v$
$A \xrightleftharpoons[a_2]{a_1} P$	$v = -a_1c_A + a_2c_P$	$v_A = v$
$A + B \xrightleftharpoons[a_2]{a_1} P + R$	$v = -a_1c_Ac_B + a_2c_Pc_R$	$v_A = v$
$A \xrightarrow{a_1} P$	$v_1 = -a_1c_A$	$v_A = v_1 + v_2$
$A \xrightarrow{a_2} R$	$v_2 = -a_2c_A$	$v_P = v_1, v_R = v_2$
$A \xrightarrow{a_1} P \xrightarrow{a_2} R$	$v_1 = -a_1c_A$ $v_2 = -a_2c_P$	$v_A = v_1$ $v_P = v_1 - v_2$

Reakcje zerowego rzędu charakteryzują się stałą (w danej temperaturze) szybkością reakcji, niezależną od stężenia substratów. Są to zazwyczaj reakcje zachodzące pod wpływem jakiegoś czynnika zewnętrznego, który w bilansie końcowym nie bierze udziału w reakcji. Często są to reakcje katalityczne, najczęściej heterogeniczne.

Różniczkowa postać równania opisującego zmiany stężenia substratu wskutek takiej reakcji jest bardzo prosta:

$$\frac{dc}{dt} = -a \quad 1.5.7,$$

a jego rozwiązaniem jest:

$$c = c_0 - at \quad 1.5.8,$$

gdzie c_0 jest stężeniem substratu w chwili $t = 0$.

Reakcje rzędu pierwszego, opisywane równaniem:

$$\frac{dc}{dt} = -ac \quad 1.5.9,$$

charakteryzują się liniową zależnością prędkości reakcji od stężenia substratu. Są to najczęściej proste reakcje rozkładu, bez udziału czynników pośrednich, zachodzące jednorodnie. Często też mamy do czynienia z reakcjami pseudo-pierwszego rzędu, kiedy ba-

damy dynamikę stężenia jakiegoś substratu przy nadmiarze stężenia innych substratów biorących udział w reakcji.

Równanie to, właśnie ze względu na swą prostotę, jest najczęściej używane w symulacji zmian stężenia substancji w sieci wodociągowej. Jego rozwiązaniem jest:

$$c = c_0 e^{-at} \quad \text{I.5.10.}$$

Reakcje rzędu n , opisywane są ogólnym równaniem:

$$\frac{dc}{dt} = -ac^b \quad \text{I.5.11,}$$

gdzie na współczynnik nieliniowości b nałożony jest, ze względów matematycznych, warunek $b \neq 1$. Rozwiązaniem ogólnym tego równania jest:

$$c = c_0 \frac{1}{[1 + (b-1)atc_0^{b-1}]^{1/(b-1)}} \quad \text{I.5.12.}$$

Rozwiązanie to, co łatwo pokazać, daje się również zredukować do rozwiązania równania rzędu zerowego; jest więc rozwiązaniem ogólnym dla wszystkich rodzajów reakcji, za wyjątkiem reakcji rzędu pierwszego.

Dwa pierwsze opisane wyżej rodzaje reakcji rzadko spotyka się w przypadku badania zmian stężenia substancji znajdujących się w wodzie wodociągowej.

Z punktu widzenia symulacji jakości wody w sieci wodociągowej, w praktyce codziennej najbardziej potrzebne wydaje się śledzenie stężenia trihalometanów (THM) — głównych produktów ubocznych procesów oczyszczania i końcowej dezynfekcji wody wodociągowej³¹ oraz śledzenie resztkowego stężenia chloru (lub innego środka odkażającego) w celu utrzymywania stabilności biologicznej wody w sieci³². Jest to szczególnie istotne ze względu na zagrożenia, jakie mogą powstać wskutek rozrostu filmu bakteryjnego wewnątrz sieci dystrybucji wody³³.

Badania doświadczalne pokazują³⁴, że istnieje związek pomiędzy stężeniem chloru $[Cl]$ a sumarycznym stężeniem THM $[TTHM]$. Pomędzy logarytmami tych stężeń zachodzi związek liniowy:

$$\log[TTHM] = b \log[Cl_2] + b_0 \quad \text{I.5.13,}$$

³¹ *Drinking Water and Health, Volume 7: Disinfectants and Disinfectant By-Products*, National Academy Press, Washington, D.C., 1978.

³² A. Braghetta, J. Jacangelo, R. Rhodes Trussell, J. Meheus *The Practice of Chlorination: Application, Efficacy, Problems and Alternatives*, "The blue pages. The IWSA information source on drinking water issues", IWSA, August 1997.

³³ *Public Water Supply Distribution Systems: Assessing and Reducing Risks — First Report*, The National Academies Press, Washington, D.C., 2005.

³⁴ T. Hrynaszkiewicz, M. Kucharski *Model matematyczny do obliczania stężenia THM w chlorowanej wodzie*, „Ochrona Środowiska”, nr. 3(78), ss. 7–12.

a zatem kinetykę tworzenia się THM można opisywać za pomocą kinetyki zużycia (konsumpcji) chloru³⁵.

Istnieje kilka modeli opisu zużycia chloru. Najprostszym z nich i najchętniej używanym jest jednak model reakcji pierwszego rzędu. Daje on wprawdzie najgorszą zgodność z danymi doświadczalnymi³⁶, lecz całkiem zadowalającą (średni kwadrat współczynnika korelacji Pearsona równy 0,88). Dwa kolejne, to modyfikacje modelu liniowego: ograniczonego zużycia do pewnej stałej pozostałości c_* (średni kwadrat współczynnika korelacji Pearsona równy 0,95):

$$\frac{dc}{dt} = -a(c - c_*) \quad \text{I.5.14}$$

oraz dwu równoległych reakcji pierwszego rzędu — szybkiej i wolnej (średni kwadrat współczynnika korelacji Pearsona równy 0,96):

$$\frac{dc}{dt} = -a_{sz}c_{sz} - a_w c_w \quad \text{I.5.15,}$$

gdzie a_{sz} i a_w oznaczają stałe szybkości reakcji odpowiednio szybkiej i wolnej, a c_{sz} i c_w stężenia chloru reagującego odpowiednio w sposób szybki i wolny.

Jednak najlepszą zgodność z danymi doświadczalnymi, choć tylko nieznacznie większą niż w dwu wcześniej wspomnianych modelach, uzyskali autorzy wskazanej tu pracy dla modelu nieliniowego (średni kwadrat współczynnika korelacji Pearsona równy 0,97). Analiza częstości najlepszego dopasowania parametru nieliniowości b daje rozkład z maksimum w punkcie 1,4, z nieznaczną skośnością dodatnią, z medianą w punkcie 1,65.

Tak więc w dalszych rozważaniach będzie brany pod uwagę model reakcji nieliniowej.

³⁵ W. A. Elshorbagy *Kinetics of THM Species in Finished Drinking Water*, "Journal of Water Resources Planning and Management", vol. 126, no. 1, January/February 2000, pp. 21–28.

³⁶ J. C. Powell, J. R. West, N. B. Hallam, C. F. Forster, and J. Simms *Performance of Various Kinetic Models for Chlorine Decay*, "Journal of Water Resources Planning and Management", vol. 126, no. 1, January/February 2000, pp. 13–20.

II. Analiza czynników wpływających na wielkość współczynnika dyspersji mechanicznej

II.1. Dotychczasowe oszacowania współczynnika dyspersji

Jak już to było wspomniane, pojęcie dyspersji mechanicznej wprowadził w 1953 roku G. I. Taylor. We wspomnianej już pracy³⁷ oszacował współczynnik dyspersji dla przepływu laminarnego ($Re < 2320$), w którym rolę czynnika dyfuzyjnego pełni dyfuzja molekularna, a profil prędkości określony jest przez prawo Hagen–Poiseuille’a:

$$u = u_0 \cdot \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) = u_0 \xi (2 - \xi) \quad \text{II.1.1,}$$

gdzie u_0 jest prędkością maksymalną, osiąganą przez płyn w osi rury. Przyjmując przedstawione już założenia, otrzymał wynik:

$$D = \frac{\bar{u}^2 R^2}{48D_m} \quad \text{II.1.2.}$$

W 1956 roku R. Aris³⁸ użył metod statystycznych do obliczenia poszczególnych momentów kształtu profilu chmury molekuł wprowadzonych impulsowo do chromatografu gazowego. Moment drugiego rzędu takiego rozkładu, będący jego wariancją σ^2 , daje w rezultacie współczynnik dyspersji:

$$\sigma^2 = 2Dt \quad \text{II.1.3.}$$

Uzyskany w ten sposób wynik, który dla przewodu o przekroju kołowym daje wartość:

$$D = D_m + \frac{\bar{u}^2 R^2}{48D_m} \quad \text{II.1.4,}$$

był nieobciążony upraszczającymi założeniami Taylora.

W 1954 roku, stosując te same założenia, co dla przepływu laminarnego, Taylor oszacował wartość współczynnika dyspersji dla w pełni rozwiniętego przepływu turbulentnego³⁹. Przyjmując ogólną postać rozwiązania równania I.3.6:

$$c' = f \frac{\partial \bar{c}}{\partial x'} \quad \text{II.1.5,}$$

gdzie f jest funkcją jedynie parametrów przepływu i kształtu przekroju poprzecznego przewodu, doszedł do wzoru na współczynnik dyspersji w postaci:

$$D = -\overline{c' f} \quad \text{II.1.6.}$$

³⁷ G. I. Taylor *Dispersion of solute matter...*

³⁸ R. Aris *On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube*, "Proceedings of The Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences", vol. 219, 1956, pp. 67–77.

³⁹ G. I. Taylor *The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe*, "Proceedings of The Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences", vol. 223, 1954, pp. 446–468.

Wartość f Taylor otrzymał przyjmując podany przez Nikuradzego⁴⁰ uniwersalny profil prędkości dla przepływu w rurach i zakładając analogię Reynoldsa transportu masy do transportu momentu pędu w ruchu turbulentnym. W rezultacie otrzymał wartość:

$$D = 10,1Ru_* \quad \text{II.1.7,}$$

którą potwierdził eksperymentalnie.

W tym miejscu należy podkreślić, że jest to jedyne znane autorowi niniejszej pracy oszacowanie współczynnika dyspersji dla przepływu turbulentnego w przewodzie zamkniętym o przekroju kołowym. Prawdopodobnie jest to jedyne znane powszechnie oszacowanie, o czym mogą świadczyć prace podejmujące zagadnienie symulacji rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w sieci wodociągowej, z uwzględnieniem zjawiska dyspersji⁴¹. Przyczyną może być fakt, iż dopiero ostatnio zauważa się potrzebę uwzględniania tego zjawiska podczas symulacji jakości wody w sieci dystrybucji wody.

Znacznie większe zainteresowanie budziło to zjawisko w przypadku symulacji przepływu w kanałach otwartych i naturalnych ciekach. Już w 1959 roku J. Elder⁴², w oparciu o analizę Taylora, podał formalny wzór na współczynnik dyspersji dla przepływu w nieskończenie szerokim kanale o głębokości h (tzn. dla warunków, gdy obecność ścian bocznych nie wpływa ani na profil prędkości, ani na współczynnik dyfuzji turbulentnej):

$$D = -h^2 \int_0^1 u' \left[\int_0^\xi \frac{1}{\varepsilon_y} \left[\int_0^\xi u' d\xi \right] d\xi \right] d\xi \quad \text{II.1.8,}$$

gdzie w tym przypadku $\xi = y/h$. Jest to, jak widać, wzór analogiczny do , właściwy dla rozwiązania we współrzędnych kartezjańskich. Całkując to równanie dla profilu czysto logarytmicznego, dla którego część zmienna w tych współrzędnych wyraża się wzorem:

$$u' = \frac{u_*}{\kappa} (1 + \ln \xi) \quad \text{II.1.9,}$$

a odpowiadająca mu funkcja, opisująca współczynnik dyfuzji turbulentnej, ma postać:

$$\varepsilon_y = hu_* \kappa \xi (1 - \xi) \quad \text{II.1.10,}$$

otrzymał wartość $D = 0,404 hu_* / \kappa^3$. Biorąc pod uwagę, iż wzór Arisa II.1.4 różni od wzoru Taylora II.1.2 o wartość współczynnika dyfuzji, zaproponował, by do tak otrzymanego wyniku dodać jeszcze uśrednioną po przekroju poprzecznym wartość współczynnika

⁴⁰ J. Nikuradse *Gesetzmäßigkeiten...*

⁴¹ Między innymi: D. H. Axworthy, B. W. Karney *Modeling Low Velocity/High Dispersion Flow in Water Distribution Systems*, "Journal of Water Resources Planning and Management", vol. 123, no. 3, May/June 1996, pp. 218–221; M. R. Islam and M. H. Chaudry *Modeling of Constituent Transport in Unsteady Flows in Pipe Networks*, "Journal of Hydraulic Engineering", vol. 124, no. 11, November 1998, pp. 1115–1124.

⁴² J. W. Elder *The dispersion of marked fluid in turbulent shear flow*, "Journal of Fluid Mechanics", vol. 5, no. 4, May 1959, pp. 544–560.

dyfuzji turbulentnej, która w tym przypadku wynosi $(\kappa/6)hu_*$. Przyjmując dla κ wartość 0,401, otrzymał ostatecznie $D = 5,93hu_*$. Również Elder potwierdził eksperymentalnie swoje obliczenia. Wkrótce pomiary terenowe w kanałach otwartych pokazały, że wartości doświadczalne zazwyczaj znacznie przewyższają wartość otrzymaną eksperymentalnie i teoretycznie przez Eldera. Dogłębną analizę przyczyn tych rozbieżności, potwierdzoną własnymi badaniami laboratoryjnymi, podał H. B. Fisher⁴³.

W przypadku przepływów w przewodach zamkniętych większe zainteresowanie budzi zjawisko dyspersji w reaktorach rurowych⁴⁴, panując w nich jednak warunki specyficzne (wysokie temperatury, duże stężenie reagentów, itp.), które rzadko odpowiadają modelowi Taylora, tak więc w tych przypadkach dyspersja określana jest na podstawie badań laboratoryjnych i modelowana raczej wzorami empirycznymi.

Celem niniejszej pracy, w części dotyczącej współczynnika dyspersji, jest zatem sprawdzenie, czy pomiary laboratoryjne profili prędkości dają wyniki spójne, jeżeli chodzi o obliczoną na ich podstawie wartość współczynnika dyspersji. Za punkt odniesienia dyskusji wyników będzie przyjęta jedyna znana wartość, otrzymana przez Taylora.

II.2. Obliczenia współczynnika dyspersji

W niniejszej pracy, jako punkt wyjściowy do obliczeń współczynnika dyspersji został przyjęty wzór I.3.10. Jest to wzór Eldera II.1.8 we współrzędnych cylindrycznych, czyli dla przypadku przepływu o symetrii osiowej. Całkę tę, ze względu na własność funkcji u' , można jednak znacznie uprościć.

II.2.1. Obliczenia symboliczne

Ze względu na definicję funkcji u' , jako odchylenia prędkości od wartości średniej dla całego przekroju poprzecznego strumienia, jej uśrednienie po całym przekroju poprzecznym musi być równe zeru:

$$\frac{2}{R^2} \int_0^R u' r dr = \bar{u}' = 0 \quad \text{II.2.1.}$$

Przyjmując następujące oznaczenia:

$$\int_0^r u' r dr = F(r) \quad \text{II.2.2}$$

⁴³ H. B. Fisher *Longitudinal dispersion in laboratory and natural streams*, Technical Report No. KH-R-12, California Institute of Technology, June 1966. Raport dostępny w World Wide Web: *Longitudinal dispersion in laboratory and natural streams* [online], W. M. Keck Laboratory of Hydraulics and Water Resources Technical Reports [dostęp: 31 maja 2005 r.]. Dostępny w wersji Portable Document Format. Tryb dostępu: <http://caltechkhr.library.caltech.edu/42/>.

⁴⁴ J. Dyduszyński *Podstawy projektowania reaktorów chemicznych*, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa 1967, ss. 59–65.

oraz

$$\int_0^r \frac{1}{r\epsilon_y} \left[\int_0^r u' r dr \right] dr = \int_0^r \frac{F(r)}{r\epsilon_y} dr = G(r) \quad \text{II.2.3.}$$

możemy całkę I.3.10, na mocy twierdzenia Leibniza – Newtona, zapisać w postaci:

$$D = -\frac{2}{R^2} \int_0^R F'(r)G(r)dr \quad \text{II.2.4.}$$

Całkując ją przez części otrzymujemy:

$$D = -\frac{2}{R^2} \int_0^R F'Gdr = -\frac{2}{R^2} [FG]_0^R + \frac{2}{R^2} \int_0^R FG'dr \quad \text{II.2.5.}$$

Pierwszy człon po prawej stronie II.2.5 znika, ze względu na własność II.2.1 i definicję II.2.2, natomiast drugi możemy przepisać w następującej postaci:

$$D = \frac{2}{R^2} \int_0^R FG'dr = \frac{2}{R^2} \int_0^R F \frac{F}{r\epsilon_y} dr = \frac{2}{R^2} \int_0^R \frac{1}{r\epsilon_y} F^2 dr = \frac{2}{R^2} \int_0^R \frac{1}{r\epsilon_y} \left[\int_0^r u' r dr \right]^2 dr \quad \text{II.2.6,}$$

a we współrzędnych bezwymiarowych:

$$D = 2R^2 \int_0^1 \frac{1}{\epsilon_y(1-\xi)} \left[\int_0^\xi u'(1-\xi)d\xi \right]^2 d\xi \quad \text{II.2.7.}$$

Jest to bardzo istotne uproszczenie obliczeń, pozwalające na sprowadzenie całej operacji do dwu etapów 1) znalezienia analitycznej, a więc ścisłej, postaci funkcji F , a następnie 2) obliczenia całki II.2.7.

Uśredniając I.4.24 po przekroju poprzecznym i odejmując otrzymaną wartość, otrzymujemy dla zmodyfikowanego profilu logarytmiczno-śladowego:

$$u' = \frac{u_*}{\kappa} \left[\left(\ln \xi + \frac{3}{2} \right) + \Pi \left(\frac{4}{\pi^2} - \cos \pi \xi \right) + \left(\frac{1}{30} - \frac{\xi^3}{3} \right) \right] \quad \text{II.2.8.}$$

Łatwo rozpoznać, że pierwszy człon pochodzi od profilu logarytmicznego, drugi od funkcji śladu, a trzeci od członu korygującego warunek brzegowy. Tak więc profil logarytmiczno-śladowy będzie pozbawiony członu ostatniego, a czysto logarytmiczny będzie posiadał tylko człon pierwszy. Na podstawie I.2.20 i II.2.8 obliczamy ϵ_y dla zmodyfikowanego profilu logarytmiczno-śladowego:

$$\epsilon_y = \text{Pr}_t v_t = Ru_*^2 \frac{1-\xi}{d\langle u \rangle / d\xi} = Ru_* \frac{\xi(1-\xi)}{1 + \Pi \pi \xi \sin \pi \xi - \xi^3} \quad \text{II.2.9.}$$

Dla profilu logarytmiczno-śladowego brak ostatniego członu w mianowniku, a dla profilu czysto logarytmicznego mianownik jest równy 1.

Wewnętrzna całka we wzorze II.2.7 dla u' jak w II.2.8 ma wartość:

$$F(\xi) = \frac{u_*}{\kappa} \left\{ \frac{1}{2} \xi [(2-\xi) \ln \xi + (1-\xi)] + \frac{2\Pi}{\pi^2} \left[\frac{\pi}{2} (\xi-1) \sin \pi \xi + \cos^2 \frac{\pi \xi}{2} - (\xi-1)^2 \right] + \frac{\xi(\xi-1)^2}{60} (4\xi^2 + 3\xi + 2) \right\} \quad \text{II.2.10.}$$

Ponownie, jak w poprzednich przypadkach, pierwszy człon pochodzi od profilu logarytmicznego, drugi od funkcji śladu, a trzeci od członu korygującego warunek brzegowy.

Tak więc, dla każdego modelu profilu prędkości, poprzez redukcję odpowiednich członów II.2.9 i II.2.10, jesteśmy w stanie skonstruować analityczną postać funkcji podcałkowej dla całki II.2.7. Ze względu na dosyć złożony kształt funkcji $F(\xi)$, całka II.2.7 została analitycznie obliczona tylko dla profilu czysto logarytmicznego, dla którego redukuje się do postaci:

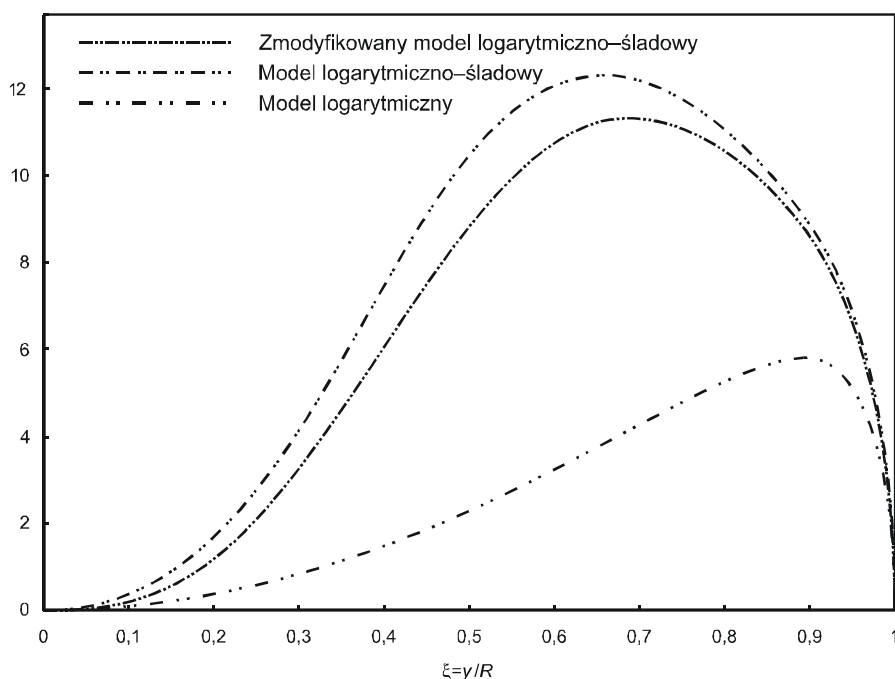
$$D = \frac{Ru_*}{2\kappa^3} \int_0^1 \xi \left[\frac{2-\xi}{1-\xi} \ln \xi + 1 \right]^2 d\xi \quad \text{II.2.11.}$$

Wartość tej całki wynosi $(Ru_*/\kappa^3)(1/8 + \zeta(3) - 1)$, gdzie $\zeta(3) \approx 1,202$ to tak zwana stała Apéry'ego — liczba niewymierna, będąca wartością funkcji ζ Riemanna w punkcie 3, co w przybliżeniu daje wynik $0,327Ru_*/\kappa^3$, czyli dla najczęściej przyjmowanej wartości κ , równej 0,401, daje wartość współczynnika dyspersji równą $5,07Ru_*$. Dla pozostałych profili, a także, w celu sprawdzenia dokładności całkowania numerycznego, również dla profilu czysto logarytmicznego, wykonano całkowanie metodą numeryczną.

II.2.2. Porównanie wyników dla różnych modeli profili prędkości

Porównując przebieg funkcji podcałkowych dla różnych profili (Rys. 6) możemy stwierdzić, że funkcje te są w kształcie bardzo podobne do siebie, wszystkie mają regularny przebieg (można pokazać na podstawie II.2.9 i II.2.10, że są ciągłe, a nawet różniczkowalne na całym obszarze całkowania i nie posiadają punktów osobliwych) i zerują się na obu końcach przedziału całkowania.

Można się więc spodziewać, że całkowanie numeryczne powinno dać wyniki bardzo zbliżone do rozwiązań ścisłych. I rzeczywiście, całkując numerycznie II.2.11 otrzymano tę samą wartość, z dokładnością do czterech cyfr znaczących. Tak więc można było z dużą dozą prawdopodobieństwa zaufać wynikom w pozostałych przypadkach.



Rys. 6. Porównanie funkcji podcałkowych (wyrażonych w wielkościach bezwymiarowych) dla różnych modeli profilu prędkości.

W pozostałych dwu przypadkach całkę II.2.7 można sprowadzić formalnie do postaci:

$$D = Ru_* \frac{I(\Pi)}{\kappa^3} \tag{II.2.12}$$

gdzie $I(\Pi)$ oznacza całkę zależną jedynie od parametru Π . Ponieważ nie ma zgodności co do jego wartości, chwilowo przyjmiemy średnią wartość tego współczynnika, uzyskaną przez Guo, równą 0,649. Dla tak dobranej wartości w przypadku profilu logarytmiczno-śladowego otrzymujemy w wyniku całkowania numerycznego $0,915Ru_*/\kappa^3$, czyli współczynnik dyspersji dla wartości κ takiej jak poprzednio wyniesie $14,18Ru_*$, co jest wartością znacznie większą od otrzymanej przez Taylora.

W przypadku zmodyfikowanego profilu logarytmiczno-śladowego Guo i Juliena otrzymujemy tą samą metodą wynik $0,809Ru_*/\kappa^3$, czyli współczynnik dyspersji dla tej samej wartości κ wyniesie $12,55Ru_*$ i jest to wartość najbardziej zbliżona do wartości otrzymanej przez Taylora, aczkolwiek dalej nieco wyższa.

Biorąc pod uwagę, że dla profilu czysto logarytmicznego otrzymaliśmy wartość współczynnika dyspersji równą $5,07Ru_*$, a więc dwukrotnie mniejszą od otrzymanej przez G. I. Taylora, możemy jasno stwierdzić, że profil czysto logarytmiczny stanowi zbyt duże uproszczenie opisu kształtu profilu prędkości i nie może być, mimo swej prostoty, brany pod uwagę przy obliczeniach współczynnika dyspersji. Różnice pomiędzy wartościami uzyskanymi z dwu pozostałych profili nie są już tak znaczne, a fakt, że zmodyfikowany

profil logarytmiczno-śladowy dał w tym przypadku wynik bliższy wartości podanej przez Taylora, może być wynikiem arbitralnego doboru wartości parametrów Π oraz κ — wartość współczynnika dyspersji jest odwrotnie proporcjonalna do trzeciej potęgi κ , a o wpływie współczynnika mocy śladu świadczy olbrzymia różnica między wartościami otrzymanymi dla profilu czysto logarytmicznego, dla którego formalnie wartość Π równa jest zeru, i logarytmiczno-śladowego. Fakt, iż zmodyfikowany profil logarytmiczno-śladowy spełnia warunek znikania pochodnej profilu w osi rury, nie może być elementem rozstrzygającym, gdyż człon korygujący jest tworem dodanym sztucznie. Jednakże faktem rozstrzygającym za tym właśnie profilem musi być przebieg funkcji opisującej lepkość turbulentną — jak pokazali to Guo i Julien⁴⁵ (por. Rys. 5), jest to jedyny profil, który oddaje przebieg tej funkcji zgodnie z danymi pomiarowymi. Zatem do obliczeń współczynnika dyspersji został wybrany zmodyfikowany profil logarytmiczno-śladowy.

II.2.3. Problem doboru wartości parametrów κ i Π

Oczywistym wnioskiem z powyższych obliczeń jest stwierdzenie, że istotnym elementem obliczania współczynnika dyspersji jest dobór wartości parametrów κ i Π . Wąski zakres zmienności podawanych wartości współczynnika κ — $0,4 \div 0,45$ — nie powinien uspokajać, zważywszy na bardzo silną teoretyczną zależność, $\sim \kappa^{-3}$, współczynnika dyspersji od tego parametru. Pierwsze oszacowanie jego wartości, $\kappa = 0,4$, pochodzi z pomiarów J. Nikuradzego⁴⁶. Często też podaje się wartość $0,401$, a najczęściej $0,41$.

Ostatnie pomiary profili prędkości przepływu turbulentnego, M. V. Zagaroli dla przepływu w przewodzie o przekroju kołowym⁴⁷ oraz J. M. Österlunda dla przepływu swobodnego nad płaską powierzchnią⁴⁸ nie rozstrzygnęły tego problemu.

Österlund i inni⁴⁹, przy tradycyjnie przyjmowanym zasięgu obszaru logarytmicznego, otrzymali dosyć wyraźną zależność współczynnika κ od liczby Reynoldsa — jego

⁴⁵ J. Guo, P. Y. Julien, op. cit.

⁴⁶ J. Nikuradse *Gesetzmäßigkeiten....*

⁴⁷ M. V. Zagarola *Mean Flow Scaling of Turbulent Pipe Flow*, Ph.D. Thesis, Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Princeton University, June 1996. Dane pomiarowe dostępne w postaci elektronicznej w World Wide Web: *Superpipe Data* [online]. Princeton Gas Dynamics and Fluid Dynamics Lab. This page last updated July 27, 1998 (isa) [dostęp: 22 marca 2004 r.]. Tryb dostępu: http://www.princeton.edu/~gasdyn/#superpipe_data.

⁴⁸ J. M. Österlund, *Experimental studies of zero pressure-gradient turbulent boundary layer flow*, Doctoral Thesis, Department of Mechanics, Royal Institute of Technology, Stockholm 1999. Dane pomiarowe dostępne w postaci elektronicznej w World Wide Web: *ZPG Turbulent Boundary Layer Data* [online]. Department of Mechanics, Royal Institute of Technology. Site updated: 21 Aug. 2000 [dostęp: 22 maja 2005 r.]. Tryb dostępu: <http://www2.mech.kth.se/~jens/zpg/index.html>.

⁴⁹ J. M. Österlund, A. V. Johansson, H. M. Nagib & M. H. Hites *A note on the overlap region in turbulent boundary layers*, "Physics of Fluids", vol. 12, no. 1, 2000, pp. 1–4.

wielkość malała od około 0,41, dla małych liczb Reynoldsa, do około 0,38, dla dużych. Autorzy twierdzą, że przy zawężeniu obszaru logarytmicznego można otrzymać stałą wartość κ , równą 0,38. Jednakże zdaniem autora niniejszej pracy, otrzymane wskutek zawężenia obszaru logarytmicznego wyniki Österlunda i innych⁵⁰ stanowią tak rozproszony zbiór wartości, zwłaszcza dla mniejszych liczb Reynoldsa, że ich wniosek nie wydaje się być przekonujący.

Opracowując inną metodą te same dane pomiarowe, jak również dane innych autorów, Buschmann i Gad-el-Hak potwierdzają wniosek Österlunda i innych, podając dla κ średnią wartość 0,384. Przedstawiony przez nich zbiór wartości κ , otrzymany dla poszczególnych pomiarów⁵¹, budzi u autora niniejszej pracy te same wątpliwości, co w przypadku wniosków Österlunda i innych.

Na podstawie pomiarów Zagaroli, Zgarola i Smits⁵² określili średnią wartość κ na $0,436 \pm 0,002$. Wartość ta była otrzymana przez standardowe dopasowanie profilu logarytmicznego do danych pomiarowych (przy zawężeniu oczywiście obszaru dopasowania tylko do obszaru logarytmicznego). Wartość ta bardzo wyraźnie odbiega od powszechnie przyjmowanych. Używając innej metody (całkowania profilu prędkości) McKeon i inni⁵³ otrzymali $0,421 \pm 0,002$ — wartość bardzo zbliżoną do proponowanej przez Barenblatta dla obwiedni rodziny krzywych potęgowych $\kappa = 2/(\sqrt{3}e) \approx 0,425$.

G. Pezzinga⁵⁴, na podstawie danych pomiarowych Nikuradzego dla rur gładkich⁵⁵, podaje następującą zależność:

$$\kappa = 0,374 + 0,0132 \ln(1 + 83100/Re) \quad \text{II.2.13.}$$

Niestety, problem parametru Π nie był rozpatrywany przez żadnego z wyżej wspomnianych autorów. Jedynie Guo⁵⁶ stosował metodę najmniejszych kwadratów, dopasowując dane Zagaroli do zaproponowanego przez siebie zmodyfikowanego profilu logarytmiczno-śladowego w wersji pierwszej. Otrzymał on zależność dla κ :

$$\kappa = 0,3527 + 0,0049 \ln Re_* \quad \text{II.2.14.}$$

⁵⁰ Ibidem, Figure 5.

⁵¹ M. H. Buschmann, and M. Gad-el-Hak, op. cit., Fig. 5 a).

⁵² M. V. Zagarola & A. J. Smits *Mean flow scaling of turbulent pipe flow*, "Journal of Fluid Mechanics", vol. 373, Cambridge University Press, October 1998, pp. 33–79.

⁵³ B. J. McKeon, J. Li, W. Jiang, J. F. Morrison and A. J. Smits *Further observations on the mean velocity distribution in fully developed pipe flow*, "Journal of Fluid Mechanics", vol. 501, Cambridge University Press, February 2004, pp. 135–147.

⁵⁴ G. Pezzinga, op. cit.

⁵⁵ J. Nikuradse *Gesetzmäßigkeiten....*

⁵⁶ J. Guo *Turbulent Velocity Profiles....*

Dla $\Omega = 2\Pi/\kappa$ wyznaczył natomiast średnią wartość 3,201 i nie znalazł żadnej tendencji do zmian wraz z Re_* . Jedyny problem stanowi fakt, iż wartości te zostały wyznaczone dla profilu, który później został zmieniony, a w pracy proponującej nowy profil, Guo i Julien⁵⁷ przyjęli dla parametrów wartości arbitralne. Niemniej sama metoda jest obiecująca, gdyż traktuje całościowo cały profil, co jest szczególnie ważne przy obliczaniu współczynnika dyspersji.

II.2.4. Wyniki obliczeń parametrów κ i Π oraz współczynnika dyspersji

Spośród szerokiego zbioru danych pomiarowych przepływów turbulentnych (dosyć obszerną ich listę można znaleźć w pracy A. E. Karpelsona⁵⁸) autor niniejszej pracy miał dostęp jedynie do danych pomiarowych J. Laufera⁵⁹ oraz M. V. Zagaroli⁶⁰ i na ich podstawie dokonywane było obliczanie współczynnika dyspersji w następujący sposób: 1) do danego profilu prędkości dobierane były metodą najmniejszych kwadratów parametry κ oraz Π , determinujące kształt profilu; 2) dla tak wyznaczonego profilu prędkości obliczana była numerycznie całka II.2.7.

Parametry κ oraz Π były obliczane dla dwóch rodzajów profili: 1) zmodyfikowanego profilu logarytmiczno-śladowego, zaproponowanego przez Guo i Julię oraz 2) dla profilu Guo i Julię, w którym człon logarytmiczny został zastąpiony funkcją Spaldinga I.4.20. Celem takiego zabiegu było sprawdzenie, czy, i w jakim stopniu, uwzględnienie obszarów lepkiego i przejściowego wpływa na wyznaczenie wartości tych parametrów, a także współczynnika dyspersji.

W pierwszym przypadku parametry wyznaczone były analitycznie. Celem uniknięcia konieczności wyznaczania stałej C w profilu I.4.24, suma kwadratów odchyłań była liczona dla profilu defektu prędkości $u_{\text{def}} = \langle u \rangle - \langle u \rangle_{\xi=1}$. Aby wyeliminować wpływ obszarów lepkiego i przejściowego, brane pod uwagę były tylko pomiary, dla których wartość $\eta > 70$. Wiązało się to z obcięciem 10 z 26 danych pomiarowych Zagaroli dla niższych liczb Reynoldsa: 31577, 41727, 56677, 74293, 98811, 145790, 185430, 230460, 309500 oraz 409290. Dane Laufera nie były analizowane tą metodą.

⁵⁷ J. Guo, P. Y. Julien, op. cit.

⁵⁸ A. E. Karpelson *Computation of Mean Velocity Distribution in a Turbulent Flow* [online]. arXiv.org e-Print archive. Physics. Authors and titles for Apr 1999. Dostępny w wersji Portable Document Format. Tryb dostępu: <http://arxiv.org/ftp/physics/papers/9904/9904030.pdf>.

⁵⁹ J. Laufer *The Structure of Turbulence in Fully Developed Pipe Flow*, NACA Report 1174, 1954. Dostępny w wersji Portable Document Format. Tryb dostępu: <http://naca.larc.nasa.gov/reports/1954/naca-report-1174/naca-report-1174.pdf>.

⁶⁰ M. V. Zagarola, op. cit.

Dla profilu I.4.24:

$$\frac{u_{\text{def}}}{u_*} = \frac{1}{\kappa} \left(\ln \xi + \frac{1 - \xi^3}{3} \right) - \Omega \cos^2 \frac{\pi \xi}{2} \quad \text{II.2.15,}$$

gdzie dla wygody przyjęto $\Omega = 2\Pi/\kappa$, suma kwadratów odchyłeń wyraża się wzorem:

$$S = \sum_i \left[\frac{u_{\text{def}i}}{u_*} - \frac{1}{\kappa} \left(\ln \xi_i + \frac{1 - \xi_i^3}{3} \right) + \Omega \cos^2 \frac{\pi \xi_i}{2} \right]^2 \quad \text{II.2.16,}$$

gdzie ξ_i oraz $u_{\text{def}i}$ oznaczają dane pomiarowe. Przyrównując pochodne po parametrach do zera:

$$\frac{\partial S}{\partial \kappa} = 0 \quad \text{oraz} \quad \frac{\partial S}{\partial \Omega} = 0 \quad \text{II.2.17,}$$

otrzymujemy układ równań:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\kappa} A_{11} - \Omega A_{12} &= A_{13} \\ \frac{1}{\kappa} A_{21} - \Omega A_{22} &= A_{23} \end{aligned} \quad \text{II.2.18,}$$

gdzie:

$$\begin{aligned} A_{11} &= \sum_i \left(\ln \xi_i + \frac{1 - \xi_i^3}{3} \right)^2 \\ A_{12} = A_{21} &= \sum_i \left(\ln \xi_i + \frac{1 - \xi_i^3}{3} \right) \cos^2 \frac{\pi \xi_i}{2} \\ A_{13} &= \sum_i \frac{u_{\text{def}i}}{u_*} \left(\ln \xi_i + \frac{1 - \xi_i^3}{3} \right) \\ A_{22} &= \sum_i \cos^4 \frac{\pi \xi_i}{2} \\ A_{23} &= \sum_i \frac{u_{\text{def}i}}{u_*} \cos^2 \frac{\pi \xi_i}{2} \end{aligned} \quad \text{II.2.19.}$$

Stąd, odpowiednio przekształcając II.2.18, łatwo można wyznaczyć κ oraz Π .

W drugim przypadku, ze względu na uwikłany charakter funkcji Spaldinga, parametry były wyznaczone za pomocą arkusza kalkulacyjnego MS Excel i narzędzia Solver, które minimalizowało w tym wypadku nie kwadraty odchyłeń $(1/u_*)(u_{\text{def}i} - u_{\text{def}})$, a kwadraty odchyłeń $\eta_i - \eta$, gdzie η_i oznacza wartość ustaloną podczas pomiaru odległość od ściany rury, dla której zmierzona wartość wynosiła $u_{\text{def}i}$. Liczona była zatem funkcja odwrotna do profilu. W przypadku profili zmierzonych przez Laufera, dobór parametrów był dokonywany tylko tą metodą, ze względu na trudności wydzielenia obszaru czysto logarytmicznego.

Otrzymane wyniki przedstawia tabela poniżej.

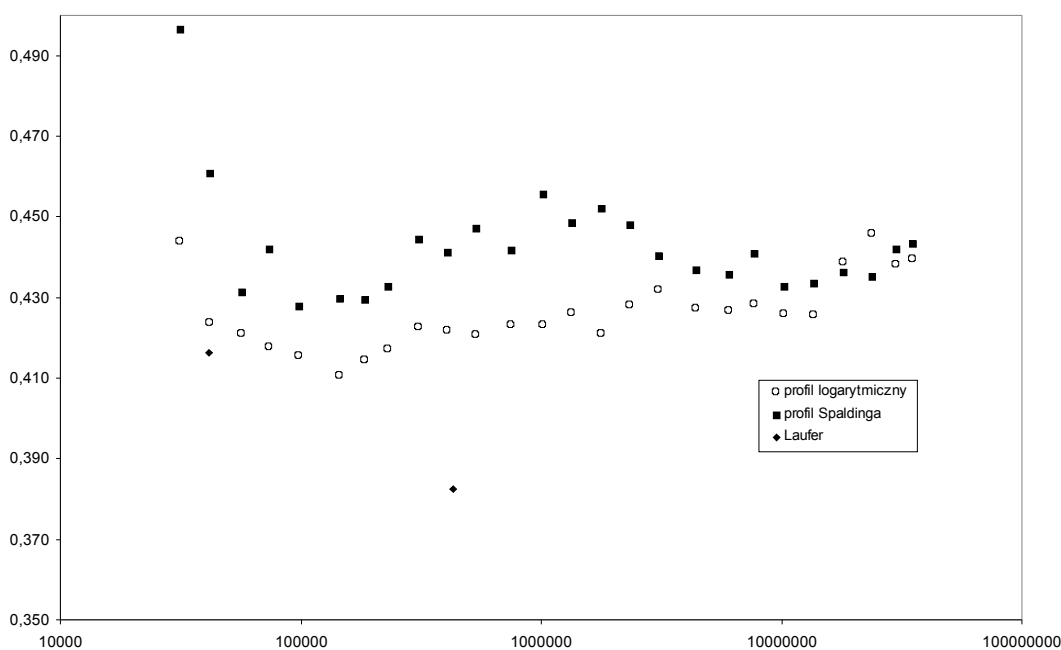
Tab. 2. Zestaw wyników dopasowania parametrów κ oraz Π , a także obliczonych na ich podstawie wartości współczynnika dyspersji w postaci bezwymiarowej D/Ru_* , do danych pomiarowych M. V. Zagaroli i J. Laufera.

Re	Profil Guo i Juliena			Profil Guo i Juliena z funkcją Spaldinga		
	κ	Π	D/Ru_*	κ	Π	D/Ru_*
Wyniki na podstawie pomiarów M. V. Zagaroli						
31577	0,444	2,438	7,97	0,496	0,645	6,65
41727	0,424	2,376	8,66	0,461	0,585	7,62
56677	0,421	2,374	8,77	0,431	0,516	8,37
74293	0,418	2,338	8,82	0,442	0,545	8,12
98811	0,416	2,277	8,76	0,428	0,500	8,38
145790	0,410	2,099	8,50	0,430	0,481	8,02
185430	0,414	2,096	8,32	0,429	0,480	8,02
230460	0,417	2,092	8,18	0,433	0,476	7,79
309500	0,422	2,061	7,85	0,444	0,484	7,28
409290	0,422	1,997	7,72	0,441	0,464	7,21
539090	0,421	1,946	7,64	0,447	0,479	7,09
751820	0,423	2,000	7,67	0,442	0,471	7,27
1023800	0,423	1,971	7,60	0,455	0,503	6,97
1340400	0,426	2,022	7,60	0,448	0,490	7,15
1787500	0,421	2,014	7,80	0,452	0,510	7,20
2345000	0,428	2,096	7,71	0,448	0,499	7,28
3098100	0,432	2,128	7,63	0,440	0,477	7,40
4420300	0,427	2,049	7,63	0,437	0,461	7,41
6072700	0,427	2,074	7,71	0,436	0,466	7,51
7714700	0,428	2,144	7,83	0,441	0,488	7,51
10249000	0,426	2,109	7,84	0,433	0,462	7,62
13598000	0,426	2,105	7,83	0,433	0,465	7,62
18196000	0,439	2,156	7,45	0,436	0,451	7,32
23977000	0,446	2,259	7,43	0,435	0,460	7,47
29927000	0,438	2,170	7,50	0,442	0,478	7,34
35259000	0,440	2,242	7,62	0,443	0,491	7,41
Wyniki na podstawie pomiarów J. Laufera						
41294				0,416	0,458	8,50
428963				0,382	0,229	7,57

II.3. Dyskusja otrzymanych wyników

Wyniki otrzymane dla parametrów κ oraz Π (odpowiednio Rys. 7 i Rys. 8), rozpatrywane dla obu źródeł danych, dają obraz niespójny. Wartości otrzymane dla pomiarów Laufera (na wykresach: „Laufer”) znacznie odbiegają od wartości otrzymanych dla danych Zagaroli, zarówno liczonych metodą pierwszą (na wykresach: „profil logarytmiczny”) jak i metodą drugą (na wykresach: „profil Spaldinga”). W przypadku samych danych Zagaroli widać różnicę w wartościach wyznaczanych dwiema różnymi metodami. Daje się jednak zauważyć w obu przypadkach podobną ogólną tendencję zmian wartości względem wartości liczby Reynoldsa. Wyniki dla dwu najniższych wartości liczby Reynoldsa wykazują znaczne odchylenie od ogólnej tendencji, zwłaszcza dla wartości

parametrów wyznaczonych drugą metodą. Przyczyną tego nie może być zatem nieuwzględnienie obszarów laminarnego i przejściowego. Autor niniejszej pracy sądzi, że powodem tego może być błąd systematyczny pomiarów Zagaroli, na który zwracają uwagę McKeon i inni⁶¹. Widać natomiast wyraźną korelację pomiędzy wartościami κ a Π dla poszczególnych pomiarów. Wprawdzie w przypadku pierwszej metody współczynnik korelacji wynosi zaledwie 0,576, ale dla drugiej sięga już wartości 0,811. Świadczy to o tym, iż oba parametry profilu należy wyznaczać łącznie, gdyż prawdopodobnie są one ze sobą sprzężone.



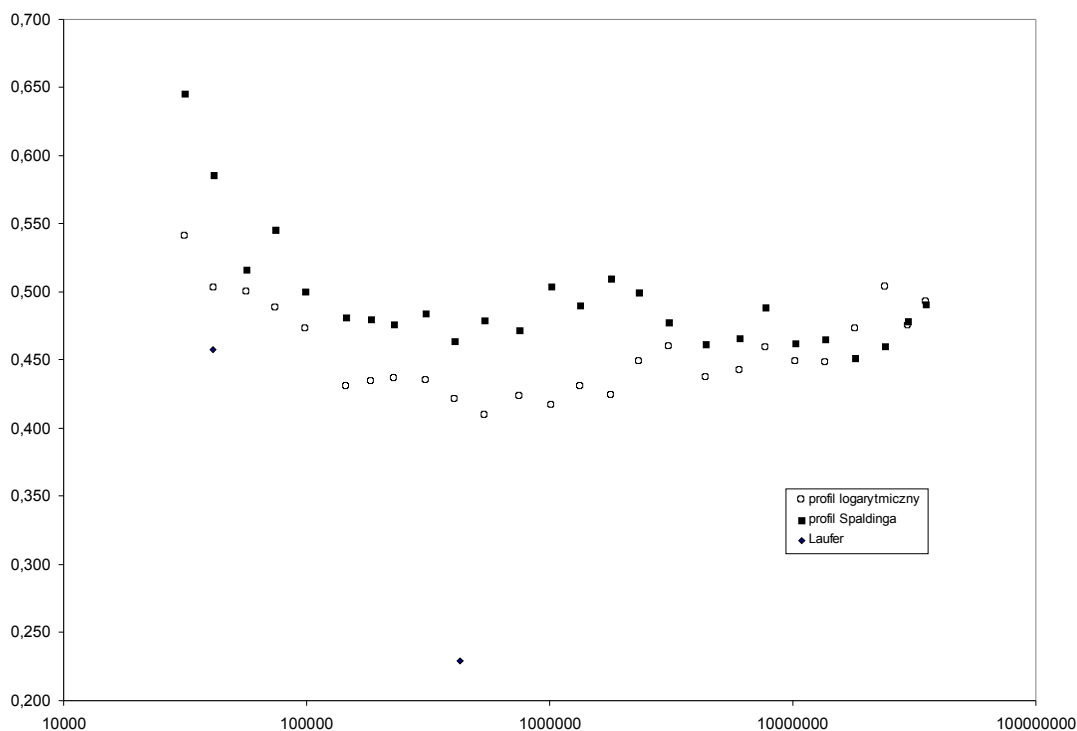
Rys. 7. Wykres zależności parametru κ (oś pionowa) od liczby Reynoldsa (oś pozioma — skala logarytmiczna). Oznaczenia: „profil logarytmiczny” — wartości parametru wyznaczone na podstawie danych pomiarowych M. V. Zagaroli metodą dopasowania zmodyfikowanego profilu logarytmiczno-śladowego Guo i Julięna; „profil Spaldinga” — wartości parametru wyznaczone na podstawie danych pomiarowych M. V. Zagaroli metodą dopasowania zmodyfikowanego profilu logarytmiczno-śladowego Guo i Julięna, w którym człon logarytmiczny zastąpiono funkcją Spaldinga; „Laufer” — wartości parametru wyznaczone na podstawie danych pomiarowych J. Laufera metodą drugą z wymienionych.

Sprzężenie tych parametrów jest również wyraźnie widoczne na wykresie zależności współczynnika dyspersji od liczby Reynoldsa (Rys. 9). Pomimo że ich wartości dla pomiarów Zagaroli znacznie odbiegają od odpowiednich dla pomiarów Laufera, wyznaczone na ich podstawie wartości współczynnika dyspersji idealnie „wpasowują się” w zbiór wartości uzyskanych z pomiarów Zagaroli.

Jeżeli pominąć wartości współczynnika dyspersji obliczonego dla liczb Reynoldsa 31577 i 41727, to rysuje się wyraźna tendencja wzrostu współczynnika dyspersji w kie-

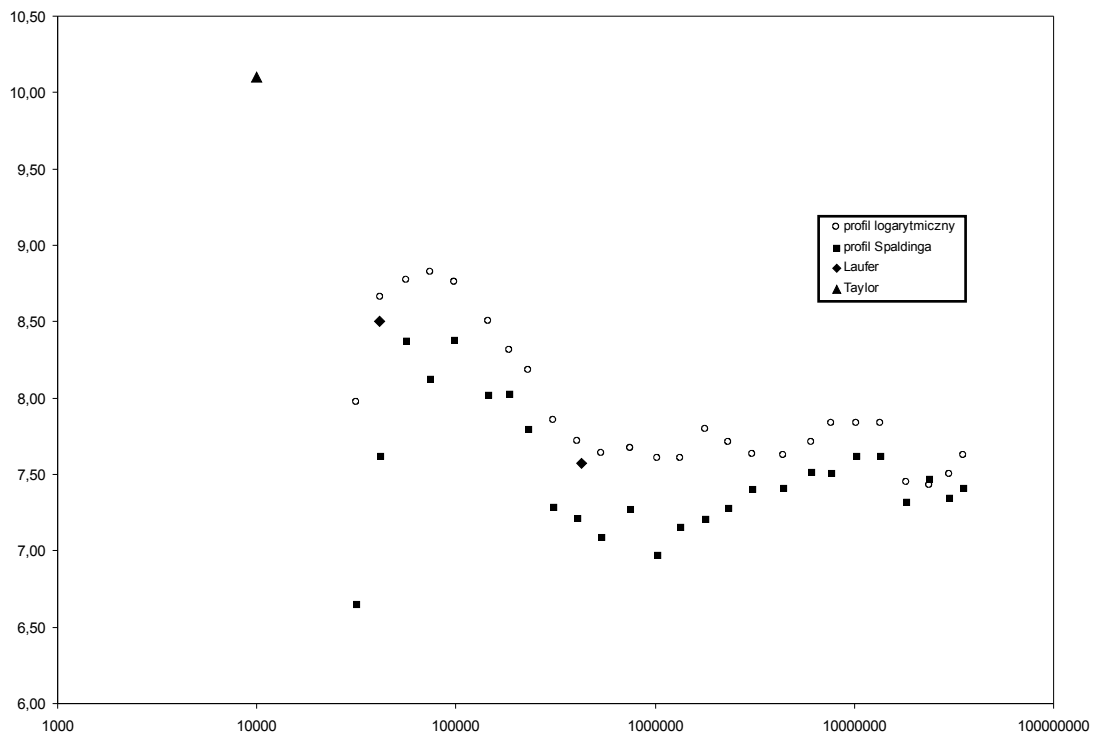
⁶¹ B. J. McKeon, J. Li, W. Jiang, J. F. Morrison and A. J. Smits, op. cit.

runku mniejszych wartości liczby Reynoldsa. Zaznaczona na wykresie wielkość uzyskana przez G. I. Taylora dla średniego profilu w punkcie $Re=10000$ wyraźnie leży na przedłużeniu tego trendu. Do wyniku tego należy jednak podchodzić ostrożnie, ze względu na dwa punkty ($Re=31577$ oraz $Re=41727$). Ich odchylenie może jeszcze raz świadczyć o wspomnianym już błędzie systematycznym, ale brak wartości dla zakresu $Re \sim 10000 \div 30000$ nie pozwala na wyciągnięcie zbyt daleko idących wniosków.



Rys. 8. Wykres zależności parametru Π (oś pionowa) od liczby Reynoldsa (oś pozioma — skala logarytmiczna). Oznaczenia: „profil logarytmiczny” — wartości parametru wyznaczone na podstawie danych pomiarowych M. V. Zagaroli metodą dopasowania zmodyfikowanego profilu logarytmiczno-śladowego Guo i Julięna; „profil Spaldinga” — wartości parametru wyznaczone na podstawie danych pomiarowych M. V. Zagaroli metodą dopasowania zmodyfikowanego profilu logarytmiczno-śladowego Guo i Julięna, w którym człon logarytmiczny zastąpiono funkcją Spaldinga; „Laufer” — wartości parametru wyznaczone na podstawie danych pomiarowych J. Laufera metodą drugą z wymienionych.

Zarysowujące się dla wartości powyżej $Re \sim 500000$ wyraźne *plateau* można interpretować dwójako — albo jest to rzeczywista tendencja zmian współczynnika dyspersji w funkcji liczby Reynoldsa, albo dopiero dla tych wartości wyznaczamy właściwą jego wartość. Drugiej interpretacji stoi jednak na przeszkodzie klasyczna już wartość Taylora, jedyna, według wiedzy autora niniejszej pracy, potwierdzona eksperymentalnie.



Rys. 9. Wykres zależności współczynnika dyspersji w skali bezwymiarowej D/Ru_* (oś pionowa) od liczby Reynoldsa (oś pozioma — skala logarytmiczna). Oznaczenia: „profil logarytmiczny” — wartości obliczone dla parametrów κ oraz Π wyznaczonych na podstawie danych pomiarowych M. V. Zagaroli metodą dopasowania zmodyfikowanego profilu logarytmiczno-śladowego Guo i Julienu; „profil Spaldinga” — wartości obliczone dla parametrów κ oraz Π wyznaczonych na podstawie danych pomiarowych M. V. Zagaroli metodą dopasowania zmodyfikowanego profilu logarytmiczno-śladowego Guo i Julienu, w którym człon logarytmiczny zastąpiono funkcją Spaldinga; „Laufer” — wartości obliczone dla parametrów κ oraz Π wyznaczonych na podstawie danych pomiarowych J. Laufera metodą drugą z wymienionych; „Taylor” — wartość otrzymana przez G. I. Taylora.

III. Analiza wpływu nieliniowości reakcji chemicznej na rozwiązania równania adwekcyjno-dyfuzyjnego z członem reakcji

Celem analizy przedstawionej w tym rozdziale jest propozycja przybliżonego rozwiązania równania adwekcyjno-dyfuzyjnego z nieliniowym członem reakcji, dla którego w ogólności nie istnieją rozwiązania analityczne. Rozwiązanie takie musi spełniać szereg założeń natury fizycznej.

1° Rozwiązanie to dla stałej reakcji chemicznej $a \rightarrow 0$ powinno zmierzać do rozwiązania analitycznego dla równania adwekcyjno-dyfuzyjnego bez członu reakcji.

2° Dla parametru nieliniowości $b \rightarrow 0$ oraz $b \rightarrow 1$ rozwiązanie to powinno zmierzać do rozwiązań analitycznych dla równania adwekcyjno-dyfuzyjnego z członami reakcji odpowiednio rzędu zerowego i pierwszego.

3° Dla warunków początkowych, w miejscu, gdzie lokalnie $\partial c_0 / \partial x \rightarrow 0$, a zatem, gdzie przestrzenne zmiany stężenia są zanedbywalnie małe, rozwiązanie to winno zmierzać do rozwiązania prostego równania kinetyki reakcji nieliniowej I.5.11.

III.1. Przykłady rozwiązań analitycznych dla liniowego członu reakcji

W efekcie zastosowania analizy Reynoldsa do opisu fluktuacji przepływu turbulentnego, a następnie analizy Taylora do opisu wpływu zmiennego profilu prędkości strumienia i dyfuzji turbulentnej na uśrednioną po przekroju poprzecznym strumienia wartość stężenia substancji rozpuszczonej w płynie, otrzymaliśmy równanie adwekcyjno-dyfuzyjne z nieliniowym członem reakcji:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} - \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} - a \bar{c}^b \quad \text{III.1.1.}$$

Poszukiwać będziemy przybliżonego rozwiązania tego problemu dla warunków początkowych rozkładu stężenia opisywanych funkcją progową postaci:

$$c_0 = c(x, t)_{t=0} = \begin{cases} c_{\max}, & x < 0 \\ c_{\min}, & x > 0 \end{cases} \quad \text{III.1.2.}$$

Wybór takich właśnie warunków początkowych znajdzie swoje uzasadnienie w następnym rozdziale, w którym zostanie zaproponowany algorytm symulacji rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w rurociągu, z uwzględnieniem zjawiska dyspersji mechanicznej.

Aby spełnić postulaty, wyrażone w punktach 1°, 2° i 3°, należy na wstępie przedstawić rozwiązania analityczne równania III.1.1 z warunkami początkowymi III.1.2 właściwe dla warunków wyrażonych w tych punktach.

III.1.1. Przypadek substancji trwałej

Warunek $a=0$ oznacza przypadek, gdy stężenie substratu nie podlega zmianom wskutek reakcji chemicznej — substancja rozpuszczona w wodzie jest trwała.

Rozwiązaniem równania III.1.1 dla warunku $a=0$ i warunku początkowego III.1.2 jest funkcja:

$$\bar{c} = c_{\max} \cdot \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(-\frac{x-\bar{u}t}{\sqrt{4Dt}}\right) + c_{\min} \frac{1}{2} \left(1 - \operatorname{erfc}\left(-\frac{x-\bar{u}t}{\sqrt{4Dt}}\right)\right) \quad \text{III.1.3,}$$

gdzie $\operatorname{erfc}(z)$, to tak zwana komplementarna funkcja błędu:

$$\operatorname{erfc}(z) \equiv 1 - \operatorname{erf}(z) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-t^2) dt = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} \exp(-t^2) dt \quad \text{III.1.4.}$$

Rozwiązanie to można przedstawić w bardziej zwartej formie:

$$\frac{\bar{c} - c_{\min}}{c_{\max} - c_{\min}} = \frac{1}{2} \cdot \operatorname{erfc}\left(-\frac{x-\bar{u}t}{\sqrt{4Dt}}\right) \quad \text{III.1.5,}$$

której interpretacja fizyczna staje się w tym momencie całkiem jasna — skok stężenia III.1.2 ulega z czasem rozmyciu, wędrując wzdłuż rurociągu, wraz z nurtem strumienia cieczy, ze średnią prędkością przepływu \bar{u} .

III.1.2. Przypadek reakcji zerowego rzędu

W tym wypadku równanie III.1.1 redukuje się do postaci:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} - \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} - a \quad \text{III.1.6.}$$

Z I.5.8 łatwo wywnioskować, że powinniśmy poszukiwać rozwiązania w postaci:

$$\bar{c} = \psi - at \quad \text{III.1.7,}$$

dla którego rozwiązanie w formie zwartej przyjmie kształt:

$$\frac{\psi - c_{\min}}{c_{\max} - c_{\min}} = \frac{\bar{c} + at - c_{\min}}{c_{\max} - c_{\min}} = \frac{1}{2} \cdot \operatorname{erfc}\left(-\frac{x-\bar{u}t}{\sqrt{4Dt}}\right) \quad \text{III.1.8.}$$

Również w tym przypadku interpretacja fizyczna rozwiązania jest całkiem jasna — wędrujący skok stężenia ulega rozmyciu, tak jak w poprzednim przypadku, a na ten proces nakłada się jeszcze, w każdym punkcie objętości płynu, niezależny od lokalnego stężenia, jednostajny spadek stężenia $\Delta \bar{c} = -at$, identyczny jak w rozwiązaniu I.5.8 równania kinetyki reakcji rzędu zerowego.

III.1.3. Przypadek reakcji rzędu pierwszego

W tym wypadku dla równania:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} - \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} - a\bar{c} \quad \text{III.1.9}$$

poszukujemy, jak łatwo wywnioskować z I.5.10, rozwiązania w postaci:

$$\bar{c} = \psi \cdot \exp(-at) \quad \text{III.1.10,}$$

dla którego rozwiązanie w formie zwartej przyjmie kształt:

$$\frac{\psi - c_{\min}}{c_{\max} - c_{\min}} = \frac{\bar{c} \cdot \exp(at) - c_{\min}}{c_{\max} - c_{\min}} = \frac{1}{2} \cdot \operatorname{erfc}\left(-\frac{x - \bar{u}t}{\sqrt{4Dt}}\right) \quad \text{III.1.11.}$$

Interpretacja fizyczna rozwiązania jest bardzo podobna do poprzedniej — wędrujący skok stężenia ulega rozmyciu, a na ten proces nakłada się eksponencjalny spadek stężenia, proporcjonalny do jego lokalnej wartości, identyczny jak w rozwiązaniu I.5.10 równania kinetyki reakcji rzędu pierwszego.

III.2. Propozycja rozwiązania dla nieliniowego członu reakcji metodą dekompozycji obszaru

Powyższe rozważania prowadzą do następującego wniosku. Każde z rozwiązań analitycznych przedstawionych powyżej jest kombinacją dwu rozwiązań 1) rozwiązania ψ jednorodnego równania adwekcyjno-dyfuzyjnego (tzn. bez członu reakcji) dla warunków początkowych III.1.2, i 2) rozwiązania równania kinetycznego reakcji \bar{c} , dla którego warunkiem początkowym jest funkcja ψ „zamrożona” w czasie i przestrzeni.

Interpretacja fizyczna takiego rozbicia rozwiązania na dwa etapy może być następująca. Oba etapy ewolucji stężenia substancji rozpuszczonej w wodzie przebiegają na różnych poziomach skali przestrzennej. Skala ewolucji opisywanej równaniem adwekcyjno-dyfuzyjnym, to co najmniej skala małych wirów przepływu turbulentnego, dla których dokonywaliśmy uśredniania w czasie t_1 . Skala ewolucji opisywanej równaniem kinetyki reakcji, to skala molekularna, kilka rzędów wielkości mniejsza.

Można zatem całą przestrzeń (obszar), w której zachodzi ewolucja stężenia, podzielić na mozaikę małych domen (dokonać dekompozycji obszaru), wewnątrz których zachodzi w sposób jednolity ewolucja stężenia, opisywana równaniem kinetyki reakcji — w prosty sposób można owe małe domeny utożsamiać z małymi wirami przepływu turbulentnego. Tak skonstruowane domeny podlegają zaś, zgodnie z analizą Taylora, ewolucji czasowo-przestrzennej jednorodnego równania adwekcyjno-dyfuzyjnego. Należy się zatem spodziewać, że rzeczywista, fizyczna ewolucja stężenia substancji, w przypadku reakcji nieliniowej nie będzie zbyt odstępować od schematu nakreślonego dla rozwiązań reakcji liniowych.

W przekonaniu autora niniejszej pracy można zatem postulować następujący schemat rozwiązania adwekcyjno-dyfuzyjnego równania ewolucji stężenia substancji rozpuszczonych w wodzie, podlegających reakcji dowolnego rzędu, o dowolnym rozkładzie stężenia w chwili początkowej. Uśrednione po przekroju poprzecznym strumienia stężenie substancji \bar{c} jest funkcją pewnej wielkości ψ taką, że \bar{c} jest rozwiązaniem równania kinetyki reakcji dla warunków początkowych wyrażonych przez funkcję ψ , które w ogólnej postaci, dla nieliniowego równania kinetyki reakcji, wyraża się wzorem:

$$\bar{c} = \psi \frac{1}{[1 + (b-1)at\psi^{b-1}]^{1/(b-1)}} \quad \text{III.2.1,}$$

natomiast ψ jest rozwiązaniem jednorodnego równania adwekcyjno-dyfuzyjnego, które w przypadku warunków początkowych III.1.2 ma kształt:

$$\frac{\psi - c_{\min}}{c_{\max} - c_{\min}} = \frac{1}{2} \cdot \operatorname{erfc}\left(-\frac{x - \bar{u}t}{\sqrt{4Dt}}\right) \quad \text{III.2.2.}$$

W oczywisty sposób rozwiązanie to spełnia również warunek 3^o, gdyż dla $\partial c_0 / \partial x \rightarrow 0$ rozwiązanie równania adwekcyjno-dyfuzyjnego $\psi \rightarrow c_0$, co w konsekwencji prowadzi \bar{c} do rozwiązania prostego równania kinetyki reakcji nieliniowej I.5.12.

Należy w tym miejscu podkreślić, że przedstawiona powyżej analiza oparta jest na fizycznej naturze opisywanych zjawisk, a zatem taka propozycja rozwiązania równania ma sens tylko w tym przypadku i nie musi być poprawna dla innych zjawisk opisywanych formalnie takim samym równaniem, w szczególności, gdy mamy do czynienia z procesem ewolucji adwekcyjno-dyfuzyjnej, gdzie dyfuzja zachodzi na tym samym poziomie molekularnym, co proces reakcji.

IV. Propozycja algorytmu symulacji rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń podlegających nieliniowym zmianom stężenia

IV.1. Przegląd dotychczas stosowanych algorytmów symulacji rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń

Dynamiczne modele propagacji zanieczyszczeń (modele jakości wody) korzystają z dynamicznych modeli działania sieci dystrybucji wody (modeli hydraulicznych). Model jakości wody może być zintegrowany w jednym programie z modelem hydraulicznym i korzystać z tej samej bazy danych, albo też, jako osobny program, może korzystać z danych wyjściowych modelu hydraulicznego, umieszczonych w osobnym pliku lub bazie danych.

Ogólnie modele hydrauliczne traktują sieci dystrybucji wody jako kompleks połączonych ze sobą w węzłach rurociągów, które na całej swej długości mają niezmiennie parametry określające warunki transportu wody. Węzły sieci nie tylko spełniają rolę połączeń rurociągów, ale też stanowią aktywne jej elementy, jako punkty poboru wody, punkty jej magazynowania i punkty zasilania sieci. Węzeł jest również punktem mieszania się kilku strumieni, o różnych stężeniach zanieczyszczeń. Tak więc sposób modelowania elementów aktywnych sieci ma istotny wpływ na modelowanie rozprzestrzeniania się w niej zanieczyszczeń i stanowi osobny problem zarówno natury teoretycznej, jak i informatycznej. Dotyczy to zwłaszcza wewnętrznych zbiorników wyrównawczych, dla których szczególnie istotny jest sposób modelowania procesu mieszania się wody wpływającej do zbiornika z jego pozostałą zawartością.

Zakłada się 24-godziną cykliczną powtarzalność pracy sieci. Okres ten w ramach symulacji pracy jest dzielony na odcinki czasowe, w trakcie których podstawowe wskaźniki opisujące pracę sieci (prędkości przepływów, wysokości hydrauliczne, pobory wody w węzłach itp.) pozostają niezmiennie, a ich wartości mogą ulec zmianie dopiero w następnym kroku czasowym. Parametry sieci dystrybucji wody zmieniają się dostatecznie wolno, by w większości przypadków były liczone w odcinkach czasowych 10–30 minut. Wynikiem modelowania pracy sieci dystrybucji wody jest podanie wartości wszystkich parametrów pracy sieci dla każdego odcinka czasowego w pełnym cyklu pracy⁶².

Zadaniem modelu jakości jest obliczenie rozkładu jej parametrów na obszarze całej sieci. W odróżnieniu do modelu hydraulicznego nie możemy zakładać takiej samej 24-godzinnej cyklicznej powtarzalności ich rozkładu. Dzieje się to nie tylko w przypadku incydentalnej iniekcji zanieczyszczeń do sieci, ale również w przypadku symulacji rozprzestrzeniania się w sieci stałych domieszek substancji pochodzących ze źródeł zasilania

⁶² K. Knapik *Dynamiczne modele w badaniach sieci wodociągowych*, Monografia 279, Wydawnictwo Politechniki Krakowskiej, Kraków 2000.

nia, na przykład chloru pochodzącego z dezynfekcji wody w stacji uzdatniania. W tym przypadku sieć, jako układ dynamiczny, może dojść po pewnym czasie do równowagi dynamicznej, ale następuje to zazwyczaj w czasie dłuższym niż 24-godzinny cykl hydraulicznej symulacji działania sieci wodociągowej.

Ze względu na strukturę czasową modelowania parametrów hydraulicznych sieci wodociągowej (stałe w poszczególnych odcinkach czasowych), najbardziej rozwiniętymi modelami jakości wody, stosowanymi w praktyce, są modele quasi-dynamiczne. Modele takie, wychodząc z rozkładu parametrów jakości wody na początku odcinka czasowego modelu hydraulicznego, obliczają ich rozkład pod koniec odcinka na podstawie parametrów hydraulicznych pracy sieci odpowiednich dla danego odcinka czasowego dając w wyniku szereg rozwiązań stacjonarnych dla odcinków czasowych modelu hydraulicznego.

Analizę parametrów poruszającego się płynu można rozpatrywać dwiema różnymi metodami — metodą Eulera i metodą Lagrange’a. Metoda Eulera, zwana też metodą lokalną, polega na badaniu parametrów kolejnych elementów płynu przepływających przez nieruchomy, ustalony punkt (lub zbiór punktów czy też powierzchnię kontrolną). Metoda Lagrange’a, zwana inaczej metodą wędrowną, polega na badaniu parametrów wybranego punktu płynu (lub zbioru punktów albo objętości płynnej) wzdłuż jego (ich albo jej) drogi. Wśród modeli quasi-dynamicznych można wyróżnić zasadniczo cztery podstawowe modele — dwa oparte na analizie Eulera, a dwa na analizie Lagrange’a⁶³.

Modele wykorzystujące metodę różnic skończonych do rozwiązywania układów równań różniczkowych opisujących rozprzestrzenianie się substancji wzdłuż rurociągów.

W najprostszym przypadku jest to jednowymiarowe równanie adwekcji–reakcji:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \bar{u} \frac{\partial c}{\partial x} - Q(c, t) \quad \text{IV.1.1.}$$

Najczęściej używanym schematem dla tego typu równania jest schemat Laxa–Wendroffa:

$$c_{ji}^{t+\Delta t} = \frac{1}{2}(1 + \alpha)c_{ji-1}^t + (1 + \alpha^2)c_{ji}^t - \frac{1}{2}\alpha(1 - \alpha)c_{ji+1}^t + Q(c_{ji}^t) \quad \text{IV.1.2,}$$

gdzie c_{ji}^t oznacza stężenie w węźle i połączenia (rurociągu) j w czasie t , natomiast $\alpha = \bar{u} \Delta t / \Delta x$.

W modelach wykorzystujących metodę różnic skończonych interwał czasowy Δt siatki czasowo-przestrzennej jest zazwyczaj dobierany raz dla całego modelowania, natomiast

⁶³ L. A. Rossman and P. F. Boulous, *Numerical Methods for Modeling Water Quality in Distribution Systems: A Comparison*, "Journal of Water Resources Planning and Management", vol. 122, no. 2, March/April 1996, pp. 137–146.

interwał przestrzenny Δx jest dobierany indywidualnie dla każdego odcinka czasowego k symulacji hydraulicznej i rurociągu j , tak aby zapewnić warunek:

$$0 < \alpha \leq 1 \quad \text{IV.1.3,}$$

k który dla tego równania jest warunkiem stabilności rozwiązań otrzymanych metodą różnic skończonych.

Czasami rezygnuje się ze stałości interwału Δt dla całego procesu symulacji i w każdym odcinku czasowym k symulacji hydraulicznej dobierany jest nowy interwał Δt_k .

Zabieg ten czyni się w celu uniknięcia sytuacji, gdy przepływ przez rurociąg następuje w czasie krótszym niż interwał czasowy, a także w celu przyspieszenia obliczeń, gdy prędkości przepływu w rurociągach są w danym odcinku symulacji hydraulicznej stosunkowo wolne.

Wadą tych metod jest efekt dyspersji numerycznej pojawiający się w rozwiązaniach równań różnicowych. Ogranicza się go stosując wielostopniowe schematy różnicowe, o szybkiej zbieżności, takie jak wspomniany już schemat Laxa–Wendroffa.

Modele wykorzystujące metodę elementów skończonych do rozwiązania układów równań różniczkowych opisujących rozprzestrzenianie się substancji wzdłuż rurociągów.

Założeniem tej metody jest znalezienie rozwiązań równania różniczkowego — w tym wypadku równania adwekcji — dla siatki wyizolowanych punktów i interpolowanie wartości rozwiązania na cały obszar. Najczęściej podział na elementy skończone dokonuje się na siatce przestrzennej, otrzymując układ równań różniczkowych zwyczajnych względem zmiennej czasowej, a te całkuje się albo analitycznie, albo metodami różnic skończonych.

Przykładem zastosowania tej metody dla sieci wodociągowych może być model zaproponowany przez W. M. Graymana, R. R. Clarka i R. M. Malesa⁶⁴, który dzieli każdy odcinek czasowy symulacji hydraulicznej na krótsze kroki czasowe Δt , a każdy rurociąg na kilka pododcinków połączonych podwężłami, tak że czas przepływu od jednego podwężła do drugiego jest równy w przybliżeniu Δt , gdyż ich ilość w poszczególnych rurociągach odpowiada stosunkowi czasu przepływu wody przez dany rurociąg do kroku czasowego Δt , zaokrąglonemu do wartości całkowitej. Tak więc odległości między podwężłami w danym kroku czasowym symulacji jakości są różne dla różnych rurociągów, a pomiędzy różnymi krokami czasowymi symulacji hydraulicznej, także dla pojedynczego rurociągu. Taki zabieg pozwala na wprowadzenie bardzo prostego algorytmu obliczania parametrów jakości wody. Stężenie niesionej przez wodę substancji w poszczególnym

⁶⁴ W. M. Grayman, R. R. Clark, and R. M. Males, *Modeling Distribution-System Water Quality: Dynamic Approach*, "Journal of Water Resources Planning and Management", vol. 114, no. 3, May 1988, pp. 295–312.

podwęźle odpowiada wartości w podwęźle poprzednim (ze względu na kierunek przepływu wody) z poprzedniego kroku symulacji jakości. Metoda ta przewiduje uwzględnienie aktywności chemicznej śledzonej substancji poprzez wprowadzenie dodatkowego mnożnika, modyfikującego stężenie substancji po czasie przepływu pomiędzy dwoma podwęźłami. Ponieważ cała masa (objętość) wody skupiona jest w równo oddalonych od siebie podwęźłach, więc można też przyjąć, że metoda ta dzieli całą masę płynącej przez rurociąg wody na równe dla danego rurociągu objętości. Stężenie substancji w każdej objętości jest przemnażane przez funkcję opisującą reaktywność substancji, a następnie cała masa w następnym kroku czasowym symulacji jakości przenoszona jest w dół strumienia do objętości sąsiedniej. W węzłach sieci następuje mieszanie wszystkich objętości wchodzących do węzła, a następnie rozdzielanie ich na poszczególne strumienie wypływające w proporcjach odpowiadających wielkościom przepływów. Czynności te powtarzane są tak długo, aż nastąpi zmiana warunków hydraulicznych w następnym kroku czasowym symulacji hydraulicznej. Ze względu na fakt, że czasy przepływów przez rurociągi zazwyczaj nie są wielokrotnościami kroku czasowego symulacji jakości, metoda ta jest podatna na błąd przesunięcia fazowego, gdyż symulowany przepływ masy przez rurociąg będzie się różnił od przepływu symulacji hydraulicznej.

Wyżej wspomniane modele posługują się opisem parametrów jakości wody w ustalonych punktach sieci dystrybucji wody. Oparte są więc na metodzie Eulera. Dwie następne wykorzystują metodę analizy wędrownej Lagrange'a.

Modele wykorzystujące analizę wędrowną sterowaną czasem polegają na śledzeniu zachodzących w czasie zmian parametrów jakości wody w szeregu wyróżnionych nie mieszających się ze sobą objętości kontrolnych w ściśle określonych przedziałach czasowych.

Przykładem takiego rozwiązania może być model po raz pierwszy zaproponowany przez C. P. Liou i J. R. Kroona⁶⁵. Model ten dzieli wodę płynącą w rurociągu na szereg objętości kontrolnych, których podział zależy jednakże, w odróżnieniu od metody poprzedniej, jedynie od koncentracji śledzonej substancji i dokładności jej pomiaru. W szczególności, jeżeli w wodzie płynącej przez rurociąg nie ma żadnych domieszek, to przez rurociąg przepływa tylko jedna objętość kontrolna. W przypadku większej ilości objętości przepływających przez rurociąg, rozmiary objętości wewnętrznych nie ulegają zmianie, jedynie stężenia śledzonej substancji w poszczególnych objętościach mogą zmieniać się wskutek jej reaktywności. Objętość kontrolna wypływająca z rurociągu zmniejsza się o wielkość równą przepływowi przez rurociąg w czasie kroku czasowego symulacji jakości

⁶⁵ C. P. Liou and J. R. Kroon, *Modeling the Propagation of Waterborne Substances in Distribution Networks*, "Journal of American Water Works Association", vol. 79, no. 11, November 1987, pp. 54–58.

ci Δt . O taką samą wielkość zwiększa się objętość wpływająca do rurociągu, jeśli w tym czasie w wodzie wpływającej nie zaszła istotna zmiana jakości, w przeciwnym wypadku produkowana jest nowa objętość wpływająca, równa wartości przepływu w czasie Δt . W węzłach sieci zachodzi mieszanie się różnych objętości wpływających, o różnych stężeniach zanieczyszczeń. Prowadzi to jednak w większości przypadków do podziału już wyróżnionych objętości na mniejsze, co w dalszej kolejności wymaga zastosowania dodatkowych procedur, redukujących zbyt dużą liczbę objętości kontrolnych. Czynnikiem ograniczającym są ustalone z góry próg dokładności śledzenia zmian koncentracji i graniczna minimalna wielkość wydzielonej objętości. Jeżeli wydzielona objętość jest zbyt mała, to dołączana jest do objętości sąsiedniej, z bliższą koncentracją substancji. Metoda ta nie jest obciążona ani dyspersją numeryczną, ani nie powoduje przesunięć fazowych. Jej dokładność zależy od wyboru kroku czasowego symulacji jakości i od progu dokładności śledzenia zmian jakości wody. Jedynym efektem czysto numerycznym jest dodatkowe (sztuczne) mieszanie się objętości o różnych stężeniach płynących kolejno przez ten sam rurociąg, jeśli te objętości wpłyną do węzła w tym samym kroku czasowym symulacji jakości.

Modele wykorzystujące analizę wędrowną sterowaną zdarzeniami, w odróżnieniu od poprzednich modeli nie śledzą zachowania się jakości wody w całej sieci w ustalonych przedziałach czasowych, a jedynie w takich momentach dla poszczególnych rurociągów, gdy dany rurociąg opuści cała wypływająca objętość. Nie zakłada się zatem z góry ustalonego kroku czasowego symulacji jakości, natomiast tworzona jest lista wszystkich przewidywanych zdarzeń (którymi są momenty opuszczenia poszczególnych rurociągów przez wypływające objętości) i parametry jakości wody są uaktualniane jedynie w miejscach i o czasie przewidywanym tą listą. Na czele listy zawsze znajduje się zdarzenie, które ma nastąpić najwcześniej. Gdy zdarzenie to zajdzie, usuwane jest z listy, zerowany jest zegar zdarzeń i aktualizowane są czasy zdarzeń na liście oraz dodawane nowe przewidywane. Cykl ten jest kontynuowany przez cały odcinek czasowy symulacji hydraulicznej sieci wodociągowej. Na początku następnego odcinka czasowego uaktualniane są parametry jakości wody i położenia wszystkich objętości. Jeśli w danym rurociągu następuje zmiana kierunku przepływu, to jego lista zdarzeń jest odwracana, a czasy zajścia zdarzeń są aktualizowane.

Metoda analizy wędrownej sterowanej zdarzeniami jest szybsza i dokładniejsza od metody poprzednio opisanej, gdyż nie wymaga przeglądania z ustaloną częstotliwością parametrów jakości wody w całej sieci i nie powoduje dodatkowych efektów mieszania, jak w przypadku poprzednim. Jej dokładność nie jest ograniczona krokiem czasowym symulacji jakości wody, a zależy jedynie od dokładności śledzenia parametrów jakości wody.

Osobny problem stanowi modelowanie jakości wody w zbiornikach wyrównawczych. Związane jest to z problemem modelowania procesów mieszania się wody wpływającej do zbiornika z wodą już tam przebywającą. Jak łatwo przewidzieć, konwekcja wody w zbiorniku, od której zależy prędkość jej mieszania się, silnie zależy od kształtu zbiornika i jego budowy wewnętrznej (ilości komór, przegród), zatem modelowanie numeryczne tego zjawiska wymagałoby rozwiązania równań różniczkowych cząstkowych w przestrzeni trójwymiarowej z warunkami brzegowymi specyficznymi dla danego zbiornika. Dlatego w praktyce stosuje się uproszczone modele mieszania się wody w zbiornikach.

Najprostszy z nich, to **model całkowitego mieszania**. Zakłada on, że, w czasie jednego kroku czasowego symulacji jakości wody, woda wpływająca w tym czasie do zbiornika w sposób doskonały zdąży się wymieszać z wodą już się tam znajdującą. Model taki wymaga oszacowania rzeczywistego czasu potrzebnego do osiągnięcia stanu dostatecznego wymieszania, co jest możliwe jedynie za pomocą pomiarów przeprowadzanych bezpośrednio w zbiornikach lub na ich modelach⁶⁶.

Przeciwieństwem powyższego modelu jest **model przepływowy**, w którym woda przepływa przez zbiornik w postaci kolejnych, nie mieszających się ze sobą objętości. W modelu tym można zatem traktować zbiornik jako jeszcze jeden odcinek rurociągu.

Modyfikacją powyższego modelu, ze względu na sposób opisu przepływu wody, jest **model odwróconego stosu**, w którym woda również wpływa do zbiornika w postaci osobnych objętości, ale wypływa z niego w odwrotnej kolejności.

Modelem pośrednim, ze względu na opis dynamiki mieszania się wody, jest **model reaktorowy**, w którym woda wpływająca do zbiornika miesza się z wodą zastaną według zadanego schematu czasowego. Zazwyczaj stosuje się schemat eksponencjalny, a stałą czasową takiego mieszania należy wyznaczyć w sposób doświadczalny indywidualnie dla każdego zbiornika. Model ten można stosować zarówno w układzie sekwencji objętości modelu przepływowego, jak i w układzie modelu odwróconego stosu. W najprostszym przypadku rozpatruje się tylko dwie objętości — objętość wpływającą i objętość zastaną. Taki schemat jest wygodny w przypadku modelowania jakości wody metodą analizy wędrowej sterowanej zdarzeniami, natomiast w przypadku metody sterowanej czasem wygodniej jest dzielić wodę w zbiorniku na objętości wpływające w poszczególnych krokach czasowych symulacji jakości, a ich konsolidacji dokonywać jedynie w przypadku, gdy nastąpi całkowite wymieszanie sąsiednich objętości.

Problem modelowania zjawiska dyspersji w sieciach dystrybucji wody nie był dotąd szeroko badany. Istnieją dotychczas nieliczne próby uwzględnienia tego problemu. Jedną z pierwszych była próba oszacowania tego zjawiska dla prostego przypadku transpor-

⁶⁶ L. A. Rossman and W. M. Grayman, *Scale-Model Studies of Mixing in Drinking Water Storage Tanks*, "Journal of Environmental Engineering", vol. 125, no. 8, August 1999, pp 755–761.

tu wzdłuż pojedynczego rurociągu, zasilanego ze zbiornika o ustalonym stężeniu rozpuszczonej w wodzie substancji, której reaktywność wyraża się poprzez prosty rozpad eksponencjalny⁶⁷. Wyniki tego oszacowania wskazują na znaczący wpływ dyspersji mechanicznej w przypadku przepływów z małą prędkością.

Pozostałe dwie, znane autorowi niniejszej pracy, próby modelowania zjawiska dyspersji w sieciach wodociągowych oparte są na wykorzystaniu dwuetapowego schematu różnicowego.

Pierwszy sposób został zaproponowany przez Islama i Chaudhry'ego⁶⁸. Pierwszy etap polegał na rozwiązaniu trzystopniowego schematu różnicowego Warminga–Kutlera–Lomaxa, o dokładności trzeciego rzędu, dla samej adwekcji, a następnie rozwiązaniu schematu różnicowego, o dokładności pierwszego rzędu, dla równania dyspersji–reakcji, z członem reakcji pierwszego rzędu. Symulacje przeprowadzone dla dwu prostych sieci z dwoma zbiornikami wyrównawczymi, przy uwzględnieniu reaktywności transportowanej substancji poprzez prosty rozpad eksponencjalny, wykazały, że uwzględnienie zjawiska dyspersji mechanicznej prowadzi do znacząco różnych, a w niektórych przypadkach do odwrotnych wyników, niż podczas symulacji rozprzestrzeniania substancji w tych samych sieciach za pomocą programu EPANET opracowanego przez U.S. Environmental Protection Agency. Różnice były szczególnie znaczące w przypadku, gdy następowały duże zmiany w prędkościach przepływu.

Nieco odmienną metodę, opartą jednak również na schematach różnicowych i także tylko dla reakcji pierwszego rzędu, zaproponowali ostatnio V. G. Tzatchkov, A. A. Aldama i F. I. Arreguin⁶⁹. W tym wypadku pierwszy etap polegał na rozwiązaniu problemu adwekcyjnego lub adwekcji-reakcji metodą wstecznych charakterystyk (dany punkt siatki przestrzennej w czasie t^{n+1} był rzutowany wzdłuż charakterystyki równania adwekcji-reakcji na siatkę w czasie t^n , a wartość stężenia była obliczana dla niego na podstawie interpolacji wartości w najbliższych węzłach siatki na którą był rzutowany. W następnym etapie, za pomocą techniki nazwanej przez autorów *techniką numerycznej funkcji Greena*, rozwiązywany był schemat różnicowy, równania dyspersji. Technika ta polega na poszukiwaniu w drugim etapie dla każdego rurociągu rozwiązania w postaci sumy trzech funkcji: dwu funkcji Greena, których wartości określone są tylko na końcach rurociągu (jednej w węźle górnym, drugiej w węźle dolnym) i funkcji *rozwiązania jednorodnego*, która znika na krańcach rurociągu. W ten sposób olbrzymi układ równań,

⁶⁷ D. H. Axworthy, and B. W. Karney, op. cit.

⁶⁸ M. R. Islam and M. H. Chaudhry, op. cit.

⁶⁹ V. G. Tzatchkov, A. A. Aldama, and F. I. Arreguin *Advection-Dispersion-Reaction Modeling in Water Distribution Networks*, "Journal of Water Resources Planning and Management", vol. 128, no. 5, September/October 2002, pp. 334–342.

produkowany przez schemat różnicowy drugiego etapu, zostaje rozbity na trzy łatwe do rozwiązania podukłady i jeden, znacznie mniejszy, układ równań dla stężeń w węzłach. Wyniki tego modelowania zostały sprawdzone dla pomiarów transportu chloru i fluoru w sieci Cherry Hill Brushy Plains, dla których U.S. Environmental Protection Agency przeprowadziła pomiary, w celu porównania obserwowanych wartości z przewidywaniami symulacji programem EPANET. Model Tzatchkova i innych w dużo lepszym stopniu oddawał wartości zmierzone w sieci, niż EPANET.

Tego typu symulacje wymagają, jak widać, skomplikowanych schematów różnicowych, głównie ze względu na potrzebę wyeliminowania efektu dyspersji numerycznej przy rozwiązywaniu równania adwekcji (czy też adwekcji–reakcji), co w przypadku symulacji jakości wody w rozległych sieciach wodociągowych, wymaga dużych mocy obliczeniowych. Nadają się więc jedynie do badań modelowych.

IV.2. Propozycja algorytmu opartego na modelu analizy wędrownej

Jak już zostało to stwierdzone, najefektywniejsze modele transportu zanieczyszczeń w sieci wodociągowej oparte są na analizie wędrownej sterowanej czasem lub zdarzeniami — ich podstawową zaletą dla jest brak efektów dyspersji numerycznej i przesunięcia w fazie. Pożądane więc by było opracowanie algorytmu symulacji rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń, uwzględniającego zjawisko dyspersji mechanicznej, opartego na tych modelach.

Podział rurociągu na objętości kontrolne, o ustalonej koncentracji substancji transportowanej, stosowany w modelach analizy wędrownej, można przedstawić jako funkcję, będącą kombinacją liniową funkcji progowych, takich jak III.1.2. Jeśli założyć, że proces dyspersji zachodzi praktycznie tylko na owych progach, to dla każdego proggu można zastosować rozwiązanie III.2.1 i w ten sposób, po czasie Δt kroku symulacji dokonać „rozmycia” dyskretnego podziału na objętości kontrolne, a następnie podzielić tak otrzymany rozkład stężenia na nowe objętości.

Wybór momentu i miejsca dokonywania symulacji „rozmycia” zależy będzie od rodzaju modelowania. 1) W przypadku modelu analizy wędrownej sterowanej czasem moment ten najprościej ustalić na końcu każdego kroku symulacji jakości wody, w każdym punkcie podziału na objętości kontrolne. 2) W przypadku modelu sterowanego zdarzeniami, symulacja „rozmycia” następowałaby tylko w miejscu i czasie zajścia konkretnego „zdarzenia”.

Jak widać, propozycja ta jest prostą modyfikacją obu modeli, polegającą na dołączeniu do istniejącego już etapu modyfikacji stężeń, wskutek zachodzących w objętościach reakcji, fazy modelowania dyspersji, w postaci prostego rozmycia proggu.

V. Podsumowanie i wnioski

W niniejszej pracy przedstawiona została analiza kilku problemów związanych z zagadnieniem modelowania rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w sieci dystrybucji wody. Jako zanieczyszczenie rozumiana tutaj była dowolna substancja rozpuszczona w wodzie, także nieszkodliwa czy wprowadzana celowo.

Analiza teoretyczna zależności współczynnika dyspersji od parametrów opisujących kształt poprzecznego profilu prędkości strumienia w rurociągu wykazała jego silną zależność od tych parametrów. Zależność od parametru κ , stałej von Kármána, okazała się być prosta do uchwycenia: $D \sim 1/\kappa^3$. Zależność od parametru Π , mocy śladu, nie dała się uchwycić w formie analitycznej, ze względu na uwikłanie tego parametru w funkcję podcałkową całki Eldera. Jednakże oszacowania jakościowe wykazały, że wartość współczynnika dyspersji oszacowana przy zaniedbaniu mocy śladu jest dwukrotnie mniejsza, niż gdy jest ona brana pod uwagę.

Obliczenia współczynnika dyspersji, dokonane na podstawie dostępnych autorowi pomiarów profili prędkości przepływu dla różnych wartości liczby Reynoldsa, pozwoliły na wyciągnięcie ostrożnych wniosków, co do jego zależności od tego parametru. Można przypuszczać, że dla liczb Reynoldsa powyżej około 500 000 bezwymiarowa wartość współczynnika dyspersji D/Ru_* ustala się na poziomie $7 \div 7,5$, natomiast dla niższych wartości liczb Reynoldsa wartość współczynnika dyspersji systematycznie rośnie.

W dalszej części, na podstawie analizy rozwiązań analitycznych równania ewolucji stężenia adwekcyjno-dyfuzyjnego z członem reakcji, dla szczególnych przypadków braku reakcji, reakcji rzędu zerowego i reakcji rzędu pierwszego, zostało zaproponowane rozwiązanie ogólne, dla dowolnego stopnia reakcji i dowolnych warunków początkowych, oparte na metodzie dekompozycji obszaru.

Na bazie takiego rozwiązania dla warunków początkowych opisywanych funkcją skoku jednostkowego, zaproponowany został algorytm modelowania rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w sieci wodociągowej, będący modyfikacją albo algorytmu analizy wędrowej sterowanej czasem, albo sterowanej zdarzeniami.

Wybór algorytmów opartych na analizie wędrowej parametrów płynu został dokonany po przeanalizowaniu wad i zalet dotychczas stosowanych modeli symulacji rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w sieciach dystrybucji wody, zarówno tych, stosowanych w celach praktycznych, jak i tych, służących do celów badawczych.

Wnioski z przedstawionej tu pracy płyną następujące:

1. Należałoby dokonać obliczeń współczynnika dyspersji dla szerszego zbioru pomiarów profili przepływu, zwłaszcza dla zakresu liczb Reynoldsa poniżej 30 000, gdyż dla

tego zakresu autor niniejszej pracy nie posiadał danych pomiarowych. Pozwoliło by to zweryfikować ostrożne wnioski wyciągnięte z dotychczasowych obliczeń. Z danych literaturowych⁷⁰ można wnioskować, że takie pomiary istnieją. Cenne były by zwłaszcza pomiary Nikuradzego⁷¹, są one jednak trudno dostępne, ze względu na czas ich publikacji (rok 1932).

2. Dalszym, pożądanym etapem analizy tego problemu, mogłoby być doświadczalne zmierzenie współczynnika dyspersji dla szerokiego zakresu liczb Reynoldsa. Pozwoliło by to na ewentualną weryfikację stosowalności wzoru Eldera i różnych proponowanych teoretycznych profili prędkości przepływu.

3. Dotychczas stosowane algorytmy, używane do modelowania rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w sieci wodociągowej, nie sprawdzają się w pewnych szczególnych warunkach pracy sieci (szybkich zmian kierunku przepływu czy przepływów powolnych). Świadczą o tym zarówno np. porównania pomiarów stanu rzeczywistego, wykonanymi przez U.S. Environmental Protection Agency, z symulacjami dokonanymi za pomocą programu EPANET, opracowanego przez tę agencję, jak i eksperymentalne symulacje oparte na wykorzystaniu schematów różnicowych, których wyniki są o wiele bardziej zbliżone do pomiarów rzeczywistych.

4. Ponieważ symulacje oparte o wykorzystanie schematów różnicowych nie są efektywne, ze względu na ich wymagania co do mocy obliczeniowej komputerów, należałoby zatem dokonać weryfikacji jakości zaproponowanego modelu symulacji rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń, opartego na efektywnych metodach analizy wędrównej, tworząc tym celu program symulacyjny, wykorzystujący zaproponowany model i porównać jego wyniki z danymi pomiarowymi.

⁷⁰ A. E. Karpelson, op. cit.

⁷¹ J. Nikuradse *Gesetzmäßigkeiten....*

Literatura

1. R. Aris *On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube*, "Proceedings of The Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences", vol. 219, 1956, pp. 67–77.
2. S. Arrhenius *Über die Reaktionsgeschwindigkeit bei der Inversion von Rohrzucker durch Säuren*, „Zeitschrift für Physikalische Chemie”, vol. 4, 1889, pp. 226–248.
3. D. H. Axworthy, B. W. Karney *Modeling Low Velocity/High Dispersion Flow in Water Distribution Systems*, "Journal of Water Resources Planning and Management", vol. 123, no. 3, May/June 1996, pp. 218–221.
4. G. I. Barenblatt, A. J. Chorin *A new formulation of the near-equilibrium theory of turbulence*, "ESAIM: Proceedings", vol. 7, 1999, pp. 24–35. Third International Workshop on Vortex Flows and Related Numerical Methods [online]. Tryb dostępu: <http://www.edpsciences.org/articlesproc/Vol.7/>.
5. G. I. Barenblatt, A. J. Chorin *Small viscosity asymptotics for the inertial range of local structure and for the wall region of wall-bounded turbulent shear flow*, "Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America", vol. 93, no. 13, June 25 1996, pp. 6749–6752.
6. G. I. Barenblatt, A. J. Chorin, O. H. Hald, and V. M. Prostokischin *Structure of zero-pressure-gradient turbulent boundary layer*, "Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America", vol. 94, no. 15, July 22 1997, pp. 7817–7819.
7. G. I. Barenblatt, A. J. Chorin, and V. M. Prostokishin *Scaling Laws for Fully Developed Turbulent Flow in Pipes*, "Applied Mechanics Reviews", vol. 50, no. 7, 1997, pp. 413–429.
8. G. I. Barenblatt, A. J. Chorin, and V. M. Prostokishin *Scaling laws for fully developed turbulent flow in pipes: Discussion of experimental data*, "Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America", vol. 94, no. 3, February 4 1997, pp. 773–776.
9. T. Bellar, J. Lichtenberg i R. Kroner, *The Occurrence of Organohalides in Chlorinated Drinking Water*, "Journal of American Water Works Association", vol. 66, 1974, p. 703.
10. M. J. Boussinesq *Essai sur la théorie des eaux courantes*. Mémoires présentés par divers Savants à l'Académie des Sciences de l'Institut National de France, tome XXIII, no. 1, Paris 1877, pp. 380–398.
11. M. J. Boussinesq *Théorie de l'écoulement tourbillant*. Mémoires présentés par divers Savants à l'Académie des Sciences de l'Institut National de France, tome XXIII, no. 1, Paris 1877, pp. 46–50.
12. A. Braghetta, J. Jacangelo, R. Rhodes Trussell, J. Meheus *The Practice of Chlorination: Application, Efficacy, Problems and Alternatives*, "The blue pages. The IWSA information source on drinking water issues", IWSA, August 1997.
13. M. H. Buschmann, and M. Gad-el-Hak *Debate Concerning the Mean-Velocity Profile of a Turbulent Boundary Layer*, "AIAA Journal", vol. 41, no. 4, April 2003, pp. 565–572.

14. D. E. Coles *The law of the wake in the turbulent boundary layer*, "Journal of Fluid Mechanics", vol. 1, no. 3, 1956, pp. 191–226.
15. *Drinking Water and Health, Volume 7: Disinfectants and Disinfectant By-Products*, National Academy Press, Washington, D.C., 1978.
16. J. Dyduszyński *Podstawy projektowania reaktorów chemicznych*, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa 1967, ss. 59–65.
17. J. W. Elder *The dispersion of marked fluid in turbulent shear flow*, "Journal of Fluid Mechanics", vol. 5, no. 4, May 1959, pp. 544–560.
18. W. A. Elshorbagy *Kinetics of THM Species in Finished Drinking Water*, "Journal of Water Resources Planning and Management", vol. 126, no. 1, January/February 2000, pp. 21–28.
19. M. G. Evans, M. Polanyi *Some Applications of the Transition State Method to the Calculation of Reaction Velocities, Especially in Solution*, "Transactions of the Faraday Society", vol. 31, 1935, p. 875.
20. H. Eyring *The Activated Complex in Chemical Reactions*, "Journal of Chemical Physics", vol. 3, 1935, pp. 107–115.
21. H. B. Fisher *Longitudinal dispersion in laboratory and natural streams*, Technical Report No. KH-R-12, California Institute of Technology, June 1966. Raport dostępny w World Wide Web: *Longitudinal dispersion in laboratory and natural streams* [online], W. M. Keck Laboratory of Hydraulics and Water Resources Technical Reports [dostęp: 31 maja 2005 r.]. Dostępny w wersji Portable Document Format. Tryb dostępu: <http://caltechkhr.library.caltech.edu/42/>.
22. R. R. Frerichs, *History, maps and the internet: UCLA's John Snow site*, "The SoC Bulletin", 2000, vol. 34, no. 2.
23. W. M. Grayman, R. R. Clark, and R. M. Males, *Modeling Distribution-System Water Quality: Dynamic Approach*, "Journal of Water Resources Planning and Management", May 1988, vol. 114, no. 3, pp. 295–312.
24. J. Guo *Discussion. A simple method for measuring shear stress on rough boundaries*, "Journal of Hydraulic Research", vol. 39, no. 4, 2001, pp. 445–446.
25. J. Guo *Turbulent Velocity Profiles in Clear Water and Sediment-Laden Flows*, PhD Dissertation, Department of Civil Engineering, Colorado State University, Fort Collins 1998.
26. J. Guo, P. Y. Julien *Modified log-wake law for turbulent flow in smooth pipes*, "Journal of Hydraulic Research", vol. 41, no. 5, 2003, pp. 493–501.
27. T. Hrynaskiewicz, M. Kucharski *Model matematyczny do obliczania stężenia THM w chlorowanej wodzie*, „Ochrona Środowiska”, nr. 3(78), ss. 7–12.
28. M. R. Islam and M. H. Chaudry *Modeling of Constituent Transport in Unsteady Flows in Pipe Networks*, "Journal of Hydraulic Engineering", vol. 124, no. 11, November 1998, pp. 1115–1124.
29. A. E. Karpelson *Computation of Mean Velocity Distribution in a Turbulent Flow* [online]. arXiv.org e-Print archive. Physics. Authors and titles for Apr 1999. Dostępny w wersji Portable Document Format. Tryb dostępu: <http://arxiv.org/ftp/physics/papers/9904/9904030.pdf>.
30. K. Knapik *Dynamiczne modele w badaniach sieci wodociągowych*, Monografia 279, Wydawnictwo Politechniki Krakowskiej, Kraków 2000.

31. J. Laufer *The Structure of Turbulence in Fully Developed Pipe Flow*, NACA Report 1174, 1954. Raport dostępny w World Wide Web: *The structure of turbulence in fully developed pipe flow* [online], National Advisory Committee for Aeronautics (NACA) Technical Report Server [dostęp: 31 maja 2005 r.]. Dostępny w wersji Portable Document Format. Tryb dostępu: <http://naca.larc.nasa.gov/reports/1954/naca-report-1174/naca-report-1174.pdf>.
32. C. P. Liou and J. R. Kroon, *Modeling the Propagation of Waterborne Substances in Distribution Networks*, "Journal of American Water Works Association", November 1987, vol. 79, no. 11, pp. 54–58.
33. B. J. McKeon, J. Li, W. Jiang, J. F. Morrison and A. J. Smits *Further observations on the mean velocity distribution in fully developed pipe flow*, "Journal of Fluid Mechanics", vol. 501, Cambridge University Press, February 2004, pp. 135–147.
34. J. Nikuradse *Gesetzmäßigkeiten der turbulenten Strömung in glatten Rohren*, VDI Forschungsheft No. 356, VDI-Verlag, Berlin 1932.
35. J. Nikuradse *Strömungsgesetze in rauhen Rohren*, VDI Forschungsheft No. 361, VDI-Verlag, Berlin 1933.
36. J. M. Österlund, *Experimental studies of zero pressure-gradient turbulent boundary layer flow*, Doctoral Thesis, Department of Mechanics, Royal Institute of Technology, Stockholm 1999. Dane pomiarowe dostępne w postaci elektronicznej w World Wide Web: *ZPG Turbulent Boundary Layer Data* [online]. Department of Mechanics, Royal Institute of Technology. Site updated: 21 Aug. 2000 [dostęp: 22 maja 2005 r.]. Tryb dostępu: <http://www2.mech.kth.se/~jens/zpg/index.html>.
37. J. M. Österlund, A. V. Johansson, H. M. Nagib & M. H. Hites *A note on the overlap region in turbulent boundary layers*, "Physics of Fluids", vol. 12, no. 1, 2000, pp. 1–4.
38. G. Pezzinga *Quasi-2D Model for Unsteady Flow in Pipe Networks*, "Journal of Hydraulic Engineering", vol. 125, no. 7, July 1999, pp. 676–685.
39. J. C. Powell, J. R. West, N. B. Hallam, C. F. Forster, and J. Simms *Performance of Various Kinetic Models for Chlorine Decay*, "Journal of Water Resources Planning and Management", vol. 126, no. 1, January/February 2000, pp. 13–20.
40. L. Prandtl *Über die Ausgebildete Turbulenz*, „Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik“, vol. 5, no. 3, 1925, pp. 136–139.
41. *Public Water Supply Distribution Systems: Assessing and Reducing Risks — First Report*, The National Academies Press, Washington, D.C., 2005.
42. O. Reynolds *On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of criterion*, "Philosophical Transactions of The Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences", vol. 186, 1895, pp. 123–164.
43. J. Rook, *Formation of Haloforms during Chlorination of Natural Water*, "Water Treatment and Examination", vol. 23, 1974, p. 234.
44. L. A. Rossman and P. F. Boulous, *Numerical Methods for Modeling Water Quality in Distribution Systems: A Comparison*, "Journal of Water Resources Planning and Management", vol. 122, no. 2, March/April 1996, pp. 137–146.

45. L. A. Rossman and W. M. Grayman, *Scale–Model Studies of Mixing in Drinking Water Storage Tanks*, “Journal of Environmental Engineering”, August 1999, vol. 125, no. 8, pp 755–761.
46. Sextus Julius Frontinus *De Aquis* [online]. Bill Thayer’s Web Site, Pagina recensa: a.d. XVI Kal. Jul. 01 [dostęp: 18 września 2002 r.]. Tryb dostępu: http://www.ukans.edu/history/index/europe/ancient_rome/L/Roman/Texts/Frontinus/De_Aquis/text*.html. W języku polskim dostępne jest tłumaczenie: Frontinus *O akweduktach miasta Rzymu*. Przełożył, opracował i wstępem opatrzył Cezary Kunderewicz, Instytut Historii Kultury Materialnej PAN, Warszawa 1961.
47. J. Snow, *On the Mode of Communication of Cholera*. Second Edition, much Enlarged, John Churchill, New Burlington Street, London MDCCCLV. Pełny tekst tego właśnie wydania *On the Mode of Communication of Cholera* dostępny jest także w postaci elektronicznej w World Wide Web: *Mode of Communication of Cholera (John Snow, 1885)* [online], Department of Epidemiology, University of California, Los Angeles, School of Public Health. Last Updated 23 Aug 2001 [dostęp: 18 września 2002 r.]. Tryb dostępu: <http://www.ph.ucla.edu/epi/snow/snowbook.html>.
48. D. B. Spalding *A Single Formula for the Law of the Wall*, “Journal of Applied Mechanics”, vol. 28, no. 3, 1961, pp. 455–458.
49. G. I. Taylor *Diffusion by Continuous Movements*, “Proceedings of The London Mathematical Society”, vol. 20, 1921, pp. 196–212.
50. G. I. Taylor *Dispersion of solute matter in solvent flowing slowly through a tube*, “Proceedings of The Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences”, vol. 219, 1953, pp. 186–203.
51. G. I. Taylor *The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe*, “Proceedings of The Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences”, vol. 223, 1954, pp. 446–468.
52. N. Tynan, *Private Water Supply in Nineteenth Century London: Re–assessing the Externalities* [online]. NBER Summer Institute — Development of the American Economy, 25 June 2000 [dostęp: 18 września 2002 r.]. Dostępny w wersji Portable Document Format. Tryb dostępu: <http://www.nber.org/~confer/2000/si2000/tynan.pdf>.
53. V. G. Tzatchkov, A. A. Aldama, and F. I. Arreguin *Advection-Dispersion-Reaction Modeling in Water Distribution Networks*, “Journal of Water Resources Planning and Management”, vol. 128, no. 5, September/October 2002, pp. 334–342.
54. E. R. Van Driest *On turbulent flow near a wall*, “Journal of the Aeronautical Sciences”, vol. 23, no. 11, 1956, pp. 1007–1011.
55. Vitruvius [Marcus Vitruvius Pollio] *De Architectura* [online], Bill Thayer’s Web Site, Situ recenso IV Id. Feb. 01 [dostęp: 18 września 2002 r.]. Tryb dostępu: http://www.ukans.edu/history/index/europe/ancient_rome/L/Roman/Texts/Vitruvius/home.html. W języku polskim dostępne jest tłumaczenie: Witruwiusz, *O architekturze ksiąg dziesięć*. Przełożył Kazimierz Kumaniecki. Wstęp Anna Sadurska; Biblioteka Antyczna, Prószyński i S-ka, Warszawa 1999.

56. S. Wu and N. Rajaratnam *A simple method for measuring shear stress on rough boundaries*, "Journal of Hydraulic Research", vol. 38, no. 5, 2000, pp. 399–400.
57. M. V. Zagarola *Mean Flow Scaling of Turbulent Pipe Flow*, Ph.D. Thesis, Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Princeton University, June 1996. Dane pomiarowe dostępne w postaci elektronicznej w World Wide Web: *Superpipe Data* [online]. Princeton Gas Dynamics and Fluid Dynamics Lab. This page last updated July 27, 1998 (isa) [dostęp: 22 marca 2004 r.]. Tryb dostępu: http://www.princeton.edu/~gasdyn/#superpipe_data.
58. M. V. Zagarola & A. J. Smits *Mean flow scaling of turbulent pipe flow*, "Journal of Fluid Mechanics", vol. 373, Cambridge University Press, October 1998, pp. 33–79.

Marek Kubala

Teoretyczna analiza wpływu wybranych czynników na propagację zanieczyszczeń w sieci wodociągowej

aneks rozprawy doktorskiej

Wstęp

Aneks zawiera poprawki i uzupełnienia do rozprawy doktorskiej, konieczne wskutek dostrzeżenia przez recenzenta szeregu błędów i niedomówień. Aneks został podzielony na dwie części: pierwsza zawiera poprawki błędów merytorycznych i redakcyjnych; druga zawiera wymagane przez recenzenta uzupełnienia.

Poprawki

Poprawka 1

W rozdziale I.1. recenzent na stronie 13 zauważa błędną postać równania transportu I.1.9 (niewłaściwe znaki przy członach adwekcyjnym i dyfuzyjnym). Błąd ten powstał wcześniej w wyniku pomyłki redakcyjnej podczas przejścia od równania I.1.7 do I.1.8 — brak zmiany znaku przy przeniesieniu członów z lewej strony równania na prawą. Błąd ten konsekwentnie powielił się w równaniach I.1.8, I.1.9, I.1.12 i I.2.3, natomiast równanie I.2.4 jest już w postaci prawidłowej.

Wyżej wymienione równania winny mieć więc prawidłową formę, jak następuje:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\operatorname{div}(\mathbf{u} \cdot c - \mathbf{D} \operatorname{grad} c) + Q \quad \text{I.1.8,}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla(\mathbf{u} \cdot c) + D_m \cdot \nabla^2 c + Q \quad \text{I.1.9,}$$

$$\frac{\partial \bar{c}(x,t)}{\partial t} = \bar{u}(t) \cdot \frac{\partial \bar{c}(x,t)}{\partial x} + D_m \cdot \frac{\partial^2 \bar{c}(x,t)}{\partial x^2} + \bar{Q}(x,t) \quad \text{I.1.12,}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla(\mathbf{u} \cdot c) + D_m \cdot \nabla^2 c \quad \text{I.2.3.}$$

Poprawka 2

Na tejsze samej stronie recenzent stwierdza błędne przejście od równania I.1.9 do równania I.1.12, jako konsekwencji uśredniania wyrażonej równaniami I.1.10 i I.1.11. Autor pragnie więc wyjaśnić, że właściwa konsekwencja uśredniania równania I.1.9 została przedstawiona w kolejnych rozdziałach rozprawy I.2 i I.3 i jest świadom iż nie można czynić takiego zabiegu, co wyraził w następującym po równaniu I.1.12 zdaniu: „Jednak dokonanie tego zabiegu na tym etapie rozważań prowadzi do pominięcia ważnego zjawiska związanego z mechaniką przepływu — dyfuzji turbulentnej”. Intencją autora było ukazanie pewnego sposobu myślowej redukcji trójwymiarowego równania przepływu substancji rozpuszczonej do quasi jednowymiarowego równania przepływu tej substancji w rurociągu i zaznaczenie właśnie, że taka redukcja jest niewłaściwa. Ponieważ jednak równanie I.1.12 zaciemnia intencje autora, więc przedostatnie zdanie rozdziału I.1, wraz z zawartym w nim równaniem I.1.12, a zaczynające się od słów „Wprowadzenie wartości uśrednionych...” i kończące się słowami „w sieci dystrybucji wody”, powinno zostać usunięte.

Poprawka 3

W rozdziale I.2. recenzent zauważa, że autor w ostatnim akapicie na stronie 15 pomylił pojęcie *turbulentnej liczby Prandtla* z pojęciem *turbulentnej liczby Schmidta*. Trzy ostatnie zdania tego akapitu winny być zastąpione następującym tekstem:

„Wielkością analogiczną do współczynnika dyfuzji turbulentnej ε_t jest dla zjawiska przenoszenia pędu kinematyczny współczynnik lepkości turbulentnej ν_t . Współczynnik proporcjonalności pomiędzy tymi wielkościami jest nazywany *turbulentną liczbą Schmidta* Sc_t (dla zjawiska dyfuzji energii cieplnej współczynnik ten nosi nazwę *turbulentnej liczby Prandtla* Pr_t). Zazwyczaj zakłada się pewną uśrednioną wartość tego współczynnika. J. O. Hinze¹ dla przyosiowej strefy przepływu turbulentnego w rurze podaje wartość $Sc_t=0,625$. B. E. Launder² natomiast dla obszaru przyściennego podaje wartość $Sc_t=0,9$. Generalnie przyjmuje się, że wielkość ta płynnie zmienia się od wartości bliskiej 1 w pobliżu ściany do wartości około 0,6 w osi przepływu. Tego typu zależność (przy założeniu pewnej analogii pomiędzy turbulentnymi liczbami Schmidta i Prandtla) dobrze w przybliżeniu opisuje wzór empiryczny, oparty na pomiarach H. Ludwiga, dla turbulentnej liczby Prandtla³:

$$Pr_t = \frac{0,649 - 0,952}{1 + \exp\left(-\frac{\xi - 0,562}{0,162}\right)} + 0,952 \quad \text{I.2.6a.}$$

Ostatnio dokonywane pomiary wskazują jednak, że w pobliżu opływanej ściany turbulentna liczba Schmidta może gwałtownie maleć. Na podstawie własnych pomiarów K. Koeltzsch⁴ podaje empiryczną zależność dla turbulentnej warstwy przyściennej:

$$Sc_t = \sum_{i=0}^5 a_i (y/\delta)^i \quad \text{I.2.6b,}$$

gdzie y oznacza odległość od ściany, a δ grubość warstwy przyściennej, natomiast współczynniki $a_0 \dots a_5$ mają odpowiednio wartości $-0,226$, $12,2$, $-46,2$, $81,0$, $-67,9$ i $21,5$. Taki wzór ma pewną wadę — otóż w pobliżu ściany przybiera niefizyczne wartości ujemne, dlatego dla potrzeb niniejszej pracy została przyjęta na podstawie pomiarów Koeltzsch następująca aproksymacja:

$$Sc_t = 0,916 \cdot \exp\left(-\ln^2(\xi/0,258)/1,673\right) + 0,051 \quad \text{I.2.6c.}$$

Powyższe zależności (I.2.6a i I.2.6c) zostaną uwzględnione w dyskusji wyników oszacowania współczynnika dyspersji, jednakże w dalszych rozważaniach przyjmujemy dla prostoty wartość $Sc_t=1$ ”.

W związku z pomyłką turbulentnej liczby Prandtla z turbulentną liczbą Schmidta ulega zmianie także wzór II.2.9, a jego właściwa postać jest następująca:

$$\varepsilon_y = \frac{\nu_t}{Sc_t} = \frac{Ru_*}{Sc_t} \cdot \frac{1-\xi}{d\langle u \rangle/d\xi} = \frac{Ru_*}{Sc_t} \cdot \frac{\xi(1-\xi)}{1 + \Pi\pi\xi \sin \pi\xi - \xi^3} \quad \text{II.2.9}$$

Dyskusja wpływu zmiennej wartości turbulentnej liczby Schmidta na wartość oszacowania współczynnika dyspersji zostanie przedstawiona w części „Uzupełnienia” tego aneksu.

¹ J. O. Hinze *Turbulence: An introduction to its mechanism and theory*, McGraw–Hill Series in Mechanical Engineering, McGraw–Hill, New York 1975; rozdział 7: “Transport of a scalar quantity in wall turbulence”.

² B. E. Launder *Heat and Mass Transport* [rozdział 6 w:] P. Bradshaw [red.] *Topics in Applied Physics, Volume 12: Turbulence*, Springer–Verlag, Berlin 1978.

³ G. Kramm, R. Dlugi, and N. Mölders *Sublayer-Stantonnumbers of heat and matter for aerodynamically smooth surfaces: basic considerations and evaluation*, “Meteorology and Atmospheric Physics”, Vol. 79, Nr. 3–4, April 2002, pp. 173–194.

⁴ K. Koeltzsch *The height dependence of the turbulent Schmidt number within the boundary layer*, “Atmospheric Environment”, Vol. 34, Issue 7, 2000, pp. 1147–1151.

Uzupełnienia

Uzupełnienie 1

Ze względu na żądane przez recenzenta oparcie wywodu przedstawionego w rozdziale I.1 na sformułowaniu praw fizycznych, które dają naukową podstawę dla równania transportu substancji rozpuszczonej, z rozdzieleniem na prawa zachowania, prawa konstytutywne i prawa stanu, poniżej przedstawione zostanie następujące uzupełnienie rozdziału I.1.

Opisując stan fizyczny ciała często zamiast przedstawiać zależność czasową parametrów ten stan opisujących przedstawiamy wzajemną zależność między nimi w postaci równania stanu. W naszym przypadku będziemy chcieli znaleźć równanie stanu dla cieczy, jaką jest woda w rurociągu wodociagowym, zawierająca domieszki w postaci roztworu. W ogólności należałoby mówić o mieszaninie, ale w większości przypadków substancje niesione przez wodę wodociagową są w niej rozpuszczone w takim stopniu, że nie stanowią mieszaniny niejednorodnej.

Równanie stanu roztworu

Równanie stanu dla cieczy często podaje się w postaci funkcji opisującej jej gęstość ρ w zależności od innych parametrów, takich jak ciśnienie p czy temperatura T . Gęstość definiujemy jako:

$$\rho = \frac{m}{V} \quad \text{U1.1.}$$

Masa roztworu jest zgodnie z *zasadą zachowania masy* sumą mas poszczególnych składników mieszaniny (indeksem zerowym została wyróżniona masa rozpuszczalnika):

$$m = m_0 + \sum_{i=1}^N m_i \quad \text{U1.2.}$$

Tak więc gęstość roztworu jest sumą stężeń jego składników:

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{m_0}{V} + \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{V} = c_0 + \sum_{i=1}^N c_i \quad \text{U1.3}$$

Aby uniknąć członu c_0 , mającego sens stężenia rozpuszczalnika w roztworze, można wprowadzić w to miejsce gęstość czystego rozpuszczalnika $\rho_0 = m_0/V_0$:

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{m_0}{V} + \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{V} = \rho_0 \frac{V_0}{V} + \sum_{i=1}^N c_i \quad \text{U1.4.}$$

Przy założeniu małych zmian ciśnienia, temperatury i małych stężeń substancji rozpuszczonych objętość roztworu można wyrazić jako kombinację liniowych zmian objętości spowodowanych poszczególnymi czynnikami, wprowadzając przybliżone empiryczne równania stanu.

Definiując średni współczynnik objętościowej rozszerzalności cieplnej rozpuszczalnika jako:

$$\beta = \frac{\Delta V_0}{V_0 \Delta T} \quad \text{U1.5}$$

oraz współczynnik ściśliwości:

$$k = -\frac{1}{V_0} \frac{\Delta V_0}{\Delta p} \quad \text{U1.6}$$

możemy wyrazić zmianę gęstości pod wpływem temperatury i ciśnienia następująco:

$$\rho_0(T) = \frac{m_0}{V_0 + \Delta V_0} = \rho_0 \frac{1}{1 + \beta \Delta T} \quad \text{U1.7}$$

oraz

$$\rho_0(p) = \frac{m_0}{V_0 + \Delta V_0} = \rho_0 \frac{1}{1 - k \Delta p} \quad \text{U1.8.}$$

Zmianę objętości wskutek rozpuszczenia substancji w rozpuszczalniku możemy zdefiniować analogicznie jako różnicę objętości roztworu i rozpuszczalnika, jednakże nie będzie ona prostą sumą objętości poszczególnych domieszek, a to ze względu na zjawisko *kontrakcji*, czyli zmianę objętości roztworu pod wpływem oddziaływań międzycząsteczkowych, a także oddziaływań chemicznych (np. dysocjacji). Suma objętości cząstkowych V'_i nie jest równa sumie objętości V_i czystych składników w tych samych warunkach ciśnienia i temperatury, a ich wartości zależą nie tylko od temperatury i ciśnienia, ale też od stężenia poszczególnych składników roztworu, których liczba M może być (ze względu na reakcje chemiczne) inna niż liczba wprowadzanych do roztworu N :

$$V - V_0 = \sum_{i=1}^M V'_i \neq \sum_{i=1}^N V_i \quad \text{U1.9.}$$

Ponieważ zmianę objętości wskutek dodania jakiegoś czynnika można w dobrym przybliżeniu traktować jako proporcjonalną do liczby molekuł wprowadzonych do roztworu, więc wprowadza się pojęcie cząstkowych objętości właściwych v'_i poszczególnych składników:

$$v'_i = \left(\frac{\partial V}{\partial m_i} \right)_{T, p, m_j, j \neq i} \quad \text{U1.10.}$$

Ostatecznie więc zmianę objętości roztworu wskutek dodania do niego molekuł substancji rozpuszczonej można określić jako sumę iloczynów mas wprowadzonych substancji i ich cząstkowych objętości właściwych:

$$V - V_0 = \sum_{i=1}^M V'_i = \sum_{i=1}^M v'_i m_i \quad \text{U1.11.}$$

Eliminując z równania U1.4 czynnik V_0/V otrzymujemy ostatecznie równanie stanu dla roztworu:

$$\rho(T, p, c_i) = \frac{\rho_0}{(1 + \beta \Delta T)(1 - k \Delta p)} \left(1 - \sum_{i=1}^N v'_i c_i \right) + \sum_{i=1}^N c_i \quad \text{U1.12.}$$

Dla wody współczynnik β zmienia się⁵ od $-0,63 \cdot 10^{-4}/\text{K}$ dla temperatury 0°C poprzez $0,88 \cdot 10^{-4}/\text{K}$ dla temperatury 10°C do $3,04 \cdot 10^{-4}/\text{K}$ dla temperatury 30°C , a zatem w tym zakresie temperatur zmiany objętości, a więc i gęstości, nie będą przekraczały 0,5% objętości pierwotnej. W przypadku zmian ciśnienia znikomość tych zmian jest jeszcze bardziej wyraźna. Średni współczynnik ściśliwości wody⁶ dla zakresu ciśnień 1–100 atm dla temperatury 5°C ma wartość $49,3 \cdot 10^{-6}/\text{atm}$, dla temperatury 15°C — $47,3 \cdot 10^{-6}/\text{atm}$ a dla temperatury 30°C — $46,0 \cdot 10^{-6}/\text{atm}$, zatem dopiero zmiany ciśnienia rzędu 100 atm dałyby efekty porównywalne ze zmianami temperatury.

Zmiany objętości wody wskutek rozpuszczenia w niej substancji rozpatrzemy na przykładzie kwasów fulwowych i huminowych — rozpuszczalnych w wodzie produktów rozkładu substancji organicznej, a zarazem głównych prekursorów tworzenia się trihalometanów w wodzie wodociągowej. Ich koncentracja w wodach powierzchniowych (a więc jeszcze nie oczyszczonych) sięga od kilku do kilkudziesięciu mg/l. W tych stężeniach ich cząstkowe objętości właściwe nie zależą praktycznie od stężenia, natomiast silnie od takich czynników, jak pH, zasolenie czy temperatura (maksymalne wartości w temperaturach 20 do 30°C).⁷ Maksymalne zmierzone wartości cząstkowych objętości właściwych dla tych substancji, to około $0,66 \text{ cm}^3/\text{g}$. Przyjmując bardzo dużą koncentrację 100 mg/l otrzymujemy wzrost

⁵ Dane na podstawie: *Poradnik fizykochemiczny*, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa 1974, s. 95.

⁶ Ibidem, s. 96.

⁷ J. W. Birkett, M. N. Jones, N. D. Bryan, F. R. Livens *The effects of solution conditions on partial specific volumes of humic substances*, "Analytica Chimica Acta", Vol. 362, Issues 2–3, 4 May 1998, pp. 299–308.

objętości rzędu 10^{-5} objętości pierwotnej, są to więc efekty znowuż dużo mniejsze od zmian temperaturowych, a oszacowania te dotyczą wody nieoczyszczonej. W świetle powyższych rozważań można więc przyjąć uproszczoną postać równania stanu:

$$\rho(c_i) = \rho_0 + \sum_{i=1}^N c_i \quad \text{U1.13.}$$

Wielkość sumy stężeń substancji rozpuszczonych po prawej stronie równania U1.13 oszacujemy biorąc pod uwagę wytyczne Światowej Organizacji Zdrowia oraz Europejskiej Wspólnoty Gospodarczej dotyczące jakości wody przeznaczonej do konsumpcji. Wytyczne te przedstawia poniższa tabela⁸.

Domieszka	Wytyczne WHO ($\mu\text{g/l}$)	Wytyczne EWG ($\mu\text{g/l}$)
Dwubromochloroetan	100	
Bromoform	100	
Kwas dwuchlorooctowy	50	
Kwas trójchlorooctowy	100	
Trójchloroacetaldehyd	10	
Dwuchloroacetonitryl	90	
Dwubromoacetonitryl	100	
Trójchloroacetonitryl	1	
Jon chlorynowy	200	
Nadtlenek wodoru		100
	Proponowana maksymalna zawartość	
Chloroform	200	40
Bromodwuchlorometan	60	15
Jon bromianowy	25	10
2,4,3-Trójchlorofenol	200	

Łączna suma tych składników nie przekracza 2 mg. Nawet jeśli przyjmiemy, że tych składników jest dziesięciokrotnie więcej i że normy zostały przekroczone dla któregoś z nich, to i tak łączna suma nie powinna przekroczyć 100 mg/l, czyli 0,1% masy rozpuszczalnika (wody). Także normy WHO dotyczące zawartości chloru czy chloroamin w wodzie są bardzo niskie — maksymalne zalecane dawki, to dla chloru 5 mg/l, a dla monochloroaminy 3 mg/l. Ostatecznie więc można przyjąć równanie stanu w najprostszej z możliwych postaci:

$$\rho = \rho_0 = \text{const.} \quad \text{U1.14.}$$

Równania konstytutywne

Równania konstytutywne są wyrazem zapisu matematycznego praw konstytutywnych, które w fizyce opisują specyficzne dla danej materii czy substancji relacje pomiędzy wielkościami fizycznymi nie wynikające bezpośrednio z ogólnych praw fizyki, takich jak prawa zachowania. W rozważaniach zawartych w rozprawie powoływałem się na dwa prawa konstytutywne.

1. Prawo Ficka

Prawo Ficka opisuje spontaniczny transport masy dążący do wyrównywania stężeń składników mieszaniny. Zjawisko to nazywamy dyfuzją molekularną. Samo zjawisko dyfuzji jest konsekwencją II prawa termodynamiki, które głosi, że „entropia każdego termodynamicznie izolowanego układu rośnie z czasem, aż do osiągnięcia wartości maksymalnej”. Samo zjawisko dyfuzji może dotyczyć różnych wielkości, nie tylko transportu masy, np. transportu ciepła (prawo Fouriera).

⁸ A. Braghetta, J. Jacangelo, R. Rhodes Trussell, J. Meheus *The Practice of Chlorination: Application Efficacy, Problems and Alternatives*, “The blue pages. The IWSA information source on drinking water issues”, IWSA, August 1997.

Prawo Ficka można sformułować następująco: „strumień masy składnika mieszaniny spowodowany zjawiskiem dyfuzji jest wprost proporcjonalny do gradientu jego koncentracji”. Można to zapisać następująco:

$$\mathbf{j}_D = -D_m \text{grad } c \quad \text{U1.15.}$$

W takim zapisie przyjęliśmy *implicite*, że zjawisko to zachodzi izotropowo, tzn. tak samo we wszystkich kierunkach i dla mieszanin typu wodnych roztworów jest to założenie słuszne. W ogólności, kiedy zjawisko nie zachodzi izotropowo (np. w kryształach), wtedy zamiast skalarnego współczynnika dyfuzji molekularnej musimy wprowadzić do równania tensor współczynnika dyfuzji:

$$\mathbf{j}_D = -\mathbf{D}_m \text{grad } c \quad \text{U1.16.}$$

Współczynnik dyfuzji zależy od temperatury (a w mieszaninach gazowych również od ciśnienia). Jego wartość dla różnych substancji rozpuszczonych w wodzie w temperaturze $\sim 20^\circ\text{C}$ są rzędu $10^{-3}\text{mm}^2/\text{s}$.

2. Prawo Newtona

Prawo to opisuje, analogicznie do prawa Ficka, zjawisko przenoszenia pędu wskutek ruchu molekuł płynu. Prawo to głosi (a w zasadzie definiuje ciecze tzw. „newtonowskie”), iż „pomiędzy naprężeniem ścinającym a szybkością ścinania zachodzi liniowa zależność”, co można wyrazić następująco:

$$\tau = \mu \dot{\gamma} \quad \text{U1.17.}$$

Szybkość ścinania $\dot{\gamma}$, to inaczej prędkość odkształcenia postaciowego albo prędkość deformacji:

$$\dot{\gamma} = \frac{\partial u_{\parallel}}{\partial x_{\perp}} \quad \text{U1.18,}$$

gdzie \parallel oznacza kierunek równoległy do powierzchni, a \perp kierunek prostopadły.

W ogólności, gdy mamy do czynienia z polem prędkości w trzech kierunkach, prawo to przedstawia się w postaci tensorowej:

$$\boldsymbol{\tau} = -\left(p + \frac{2}{3}\mu \text{div } \mathbf{u}\right)\mathbf{1} + 2\mu\mathbf{D} \quad \text{U1.19,}$$

gdzie $\boldsymbol{\tau}$ jest tensorem naprężeń, $\mathbf{1}$ to tensor jednostkowy, natomiast \mathbf{D} jest tensorem prędkości deformacji:

$$\mathbf{D}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \quad \text{U1.20.}$$

Elementy diagonalne tego tensora są naprężeniami normalnymi równymi ciśnieniu hydrodynamicznemu, natomiast elementy nediagonalne są naprężeniami stycznymi w płaszczyźnie ij .

Równania zachowania

Równania zachowania są konsekwencją przyjęcia w fizyce kilku zasad zachowania. Są nimi: 1) zasada zachowania masy, 2) zasada zachowania pędu, 3) zasada zachowania momentu pędu i 4) zasada zachowania energii. W rozważaniach zawartych w rozprawie pośrednio powoływaaliśmy się (poprzez pewne założenia) na trzy pierwsze.

Przede wszystkim z przyjęcia zasady zachowania masy dla roztworu jako cieczy jednorodnej i równania stanu w postaci U1.14 wynika wniosek, że pole prędkości takiego płynu jest polem bezźródłowym, co można wyrazić następująco:

$$\text{div } \mathbf{u} = 0 \quad \text{U1.21.}$$

Na tę zależność powoływaaliśmy się w równaniu I.2.7 rozprawy.

Z zasady zachowania pędu dla całości płynu oraz U1.14 i U1.21 wynika równanie Naviera–Stokesa, które przedstawione zostało w I.2.9 rozprawy.

Natomiast z zasady zachowania momentu pędu dla całości płynu wynika symetryczność tensora naprężeń.

Poniżej przedstawione zostaną rozważania prowadzące do równania transportu substancji zawartej w roztworze.

Rozważając objętość kontrolną V o powierzchni bocznej $\partial V = S$, możemy sformułować **zasadę zachowania masy** dla substancji zawartej w roztworze wewnątrz tej objętości następująco: „zmiana masy substancji zawartej w objętości kontrolnej jest równa sumie strumienia tej substancji przez powierzchnię kontrolną i wydajności jej źródeł”.

Transport masy może zachodzić na trzy sposoby: 1) adwekcyjnie, 2) dyfuzyjnie, 3) poprzez promieniowanie. W naszym przypadku znaczenie mają tylko dwa pierwsze mechanizmy. Element strumienia transportu adwekcyjnego przez element powierzchni dS , rozumiany jako wektor normalny do tego elementu i skierowany na zewnątrz, o wartości równej jego powierzchni, można wyrazić następująco:

$$dj_A = -cudS \quad \text{U1.22,}$$

natomiast element strumienia transportu dyfuzyjnego przez element powierzchni wyrazimy jako:

$$dj_D = -(-D_m \text{grad } c)dS \quad \text{U1.23.}$$

Ujemny znak po lewej stronie równań U1.22 i U1.23 oznacza, że dodatni kierunek strumienia jest skierowany przeciwnie do wektora normalnego do powierzchni. Całkowity strumień substancji będzie równy całce po powierzchni kontrolnej:

$$\mathbf{j} = -\int_S (c\mathbf{u} - D_m \text{grad } c)dS \quad \text{U1.24,}$$

natomiast masa substancji zawarta w objętości kontrolnej będzie równa całce z jej stężenia po tej objętości:

$$m = \int_V cdV \quad \text{U1.25.}$$

Trzeci element tego bilansu będzie sumą funkcji źródłowych dla tej substancji:

$$Q = \sum_i \int_V q_i dV \quad \text{U1.26.}$$

Równoważność zmiany masy substancji w objętości kontrolnej i strumienia przez powierzchnię kontrolną oraz źródeł tej substancji, która to równoważność, jak już powiedzieliśmy, wynika z **zasady zachowania masy**, możemy wyrazić w następujący sposób:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V cdV = -\int_S (c\mathbf{u} - D_m \text{grad } c)dS + \int_V \sum_i q_i dV \quad \text{U1.27.}$$

Stosując dla całki po powierzchni różniczkowe prawo Gaussa otrzymujemy:

$$\int_V \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}(c\mathbf{u} - D_m \text{grad } c) - \sum_i q_i \right) dV = 0 \quad \text{U1.28.}$$

Ponieważ objętość kontrolną przyjęliśmy w sposób dowolny, więc również lokalnie powyższa równość winna być spełniona:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}(c\mathbf{u}) - D_m \text{div grad } c = \sum_i q_i \quad \text{U1.29.}$$

Powyższe równanie jest równoważne równaniu I.1.9 w rozprawie w wersji poprawionej w aneksie w Poprawce 1:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\mathbf{u}) = D_m \nabla^2 c + \sum_i q_i \quad \text{U1.30.}$$

Uzupełnienie 2

Ze względu na żądane przez recenzenta zestawienia „tych procesów źródłowych, które mogą mieć znaczenie przy opisie transportu zanieczyszczeń w sieciach wodociągowych, a które uzasadniają tak silny akcent, który Autor kładzie na nieliniowość funkcji źródłowych”. Poniżej zostanie przedstawione uzasadnienie wyboru nieliniowej funkcji źródłowej do opisu kinetyki zmian stężenie wskutek reaktywności substancji.

Z punktu widzenia sposobu modelowania zanieczyszczeń w sieci wodociągowej, funkcje źródłowe możemy podzielić na dwa rodzaje: 1) punktowe i 2) rozciągłe. Funkcje punktowe odzwierciedlają wprowadzenie substancji do sieci wodociągowej w jakimś węźle sieci, modelowane są więc przez ustalenie w takim węźle odpowiednich warunków brzegowych. Funkcje rozciągłe reprezentują przemiany substancji wskutek reakcji chemicznych, procesów fizycznych (takich jak np. wytrącanie się na ścianach rurociągów albo sorpcja) czy procesów biologicznych.

W przypadku substancji trwałych, reagujących ze stałą prędkością (zerowy rząd reakcji) czy reakcji liniowych (pierwszy rząd reakcji) modelowanie funkcji źródłowych nie stanowi problemu, gdyż metody w oparciu o takie modele reakcji są dobrze rozwinięte. Pozostaje więc pytanie, czy istnieje potrzeba uwzględniania w zadaniu symulacji rozprzestrzeniania się substancji w sieci wodociągowej także reakcji nieliniowej.

Jednym z podstawowych problemów eksploatacyjnych są zjawiska wtórnego zanieczyszczenia wody produktami pochodzącymi z reakcji wywołanych dezynfekcją wody, z drugiej zaś strony rozwój w sieci bakterii chorobotwórczych spowodowany zbyt niską pozostałą w wodzie dawką środka dezynfekcyjnego. Do dezynfekcji używa się takich środków, jak: wolny chlor, dwutlenek chloru, chloroaminy, ozon i promieniowanie ultrafioletowe. Z tych środków jedynie wolny chlor, dwutlenek chloru i chloroaminy są przydatne do stabilizacji biologicznej wody wprowadzanej do sieci wodociągowej.

Głównymi szkodliwymi produktami ubocznymi chlorowania wody są mutagenne trójhalometany, powstałe głównie podczas chlorowania wód naturalnych zabarwionych, które zawierają substancje humusowe i produkty ich rozkładu.

W przypadku dezynfekcji wody dwutlenkiem chloru głównymi szkodliwymi dla zdrowia związkami są powstające w tym procesie chloryny i chlorany. Jednakże, ze względu na pewną zawartość wolnego chloru w technicznym dwutlenku chloru, w procesie dezynfekcji tym środkiem również powstają pewne ilości trójhalometanów.

Monochloroamina jest jednym z najlepszych środków dezynfekujących, ze względu na najmniejszą zdolność do produkcji trójhalometanów, jednakże jej efektywność jako środka stabilizującego jest najmniejsza z trzech wymienionych.

Pomimo uzdatniania, wprowadzana do sieci wodociągowej woda zawiera jeszcze szereg śladowych ilości prekursorów szkodliwych produktów dezynfekcji, co powoduje z jednej strony wtórne pojawianie się ich w sieci wskutek reakcji prekursorów z dezynfektantem, zapewniającym biologiczną stabilność wody, a z drugiej strony te same reakcje prowadzą do zmniejszenia dawki dezynfektanta w wodzie, czego skutkiem może być rozwój mikroorganizmów w sieci. Kinetyka tych procesów jest bardzo złożona, gdyż zachodzi tutaj wiele reakcji równoległych, z różnymi prędkościami, nieraz wielostopniowych. Najlepiej rozpoznana, ze względu na potencjalną szkodliwość produktów jest kinetyka reakcji zachodzących podczas chlorowania.

Jak to już zostało wspomniane w rozprawie (str. 33) istnieje związek pomiędzy stężeniem chloru w wodzie a stężeniem produktów chlorowania, zatem kinetykę powstawania trójhalometanów można opisać za pomocą zużycia (konsumpcji) chloru. Konieczność umiejętności przewidywania resztkowej zawartości środka dezynfekującego w każdym punkcie sieci wodociągowej jest jednak nie tylko ważna z tego powodu. Istotniejsze znaczenie ma fakt, iż zbyt mała dawka środka dezynfekującego nie powstrzymuje rozwoju mikroorganizmów. Dlatego umiejętność przewidywania stężenia środka dezynfekującego w każdym punkcie sieci ma bardzo istotne znaczenie w trakcie jej projektowania (pozwala uniknąć stref potencjalnie obniżonej jego dawki) i eksploatacji.

Istnieje kilka modeli kinetyki zużycia chloru w wodach wodociągowych. Oczywiście najpopularniejszym modelem jest **model liniowy**:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -ac \quad \text{U2.1.}$$

Jego podstawową zaletą jest łatwa implementacja w symulatorach jakości wody. Jak wykazują badania⁹, daje on najgorszą zgodność z pomiarami laboratoryjnymi (średni kwadrat współczynnika korelacji 0,88).

Model ograniczonego zużycia do pewnej stałej wartości c_* zakłada, że zawartość chloru spada do pewnej pozostałej wartości.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -a(c - c_*) \quad \text{U2.2.}$$

Taki mechanizm mógłby zachodzić, gdyby nastąpiło całkowite zużycie substratów. W praktyce jednak bardzo trudno określić wartość parametru c_* , ze względu na jego niską wartość. Zachodzi obawa, że tak wyznaczone (różne od zera) wartości są efektem statystyki pomiaru, a nie rzeczywistym.

Lepszym od niego modelem, często używanym jest **model dwu równoległych reakcji** pierwszego rzędu — szybkiej i wolnej:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -a_{sz}c_{sz} - a_w c_w \quad \text{U2.3.}$$

Model ten uwzględnia wielotorowość zachodzących reakcji i dzieli je na zespół szybkich i wolnych. Model ten zdaniem autorów wspomnianej pracy jest modelem jednym najlepszych, ale wymagającym wyznaczenia największej liczby parametrów.

Wreszcie **model nieliniowy** n rzędu:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -ac^n \quad \text{U2.4.}$$

jest obok poprzednio wspomnianego najlepiej pasującym do pomiarów laboratoryjnych (średni kwadrat współczynnika korelacji 0,97). Wyznaczony we wspomnianej pracy rozkład parametru nieliniowości daje wartość średnią dla tego parametru równą 1,4, a mediana rozkładu wypada w punkcie 1,6.

Autor nie kładzie nacisku właśnie na ten model funkcji źródłowej, bo konkurencyjnym modelem jest model równoległy, a model liniowy również w większości przypadków dobrze spełnia swoją rolę. Wybór tego modelu wynikał z faktu, iż model ten (ze względu na swą prostotę i ogólność) jest coraz chętniej stosowany w symulacjach jakości wody (np. program *Epanet*), gdy nie uwzględniamy zjawiska dyspersji, i uważa się, że jest to poprawienie zdolności symulacyjnych programu. Trudność stanowi dopiero próba zastosowania tego modelu łącznie z uwzględnieniem zjawiska dyspersji. Przedstawiona w rozdziale propozycja wydaje się prostym rozwiązaniem tego problemu.

Uzupełnienie 3

W związku z „Poprawką 3” „Aneksu” rozdział II.3 rozprawy zostaje uzupełniony o następujący fragment:

Dotychczasowe oszacowanie przeprowadzone było przy założeniu pełnej odpowiedniości współczynnika dyfuzji ε_t turbulentnej i kinematycznego współczynnika lepkości turbulentnej ν_t . Przyczyną takiego podejścia był fakt, iż zarówno Taylor, do którego jedyne oszacowanie współczynnika dyspersji dla przepływu w rurociągu odnosimy się, jak też Elder, którego wzoru używamy do własnego oszacowania, zakładali w swoich oszacowaniach właśnie taką odpowiedniość. Jak wynika z porównania wzorów II.2.7 i II.2.9 (wersja poprawiona w „Poprawce 3” „Aneksu”), aby uwzględnić zmienną czy też stałą, ale różną od 1, wartość turbulentnej liczby Schmidta, wystarczy przemnożyć przez nią funkcję podcałkową II.2.10. Wyniki dla obu podanych w Aneksie profili $S_c(\xi)$, I.2.6a i I.2.6c, przedstawia poniższa tabela.

⁹ J. C. Powell, J. R. West, N. B. Hallam, C. F. Forster, and J. Simms *Performance of Various Kinetic Models for Chlorine Decay*, „Journal of Water Resources Planning and Management”, vol. 126, no. 1, January/February 2000, pp. 13–12.

Tab. 3. Porównanie oszacowań współczynnika dyspersji dla różnych profili turbulentnej liczby Schmidta $Sc_t(\xi)$. Wartości średnie zostały obliczone jako ilorazy wartości współczynnika dyspersji dla danego profilu $Sc_t(\xi)$ i dla $Sc_t=1$.

Re	Profil Guo i Juliena					Profil Guo i Juliena z funkcją Spaldinga				
	D/Ru^* dla $Sc_t=1$	D/Ru^* dla Sc_t jak w l.2.6c	średnie Sc_t dla l.2.6c	D/Ru^* dla Sc_t jak w l.2.6a	średnie Sc_t dla l.2.6a	D/Ru^* dla $Sc_t=1$	D/Ru^* dla Sc_t jak w l.2.6c	średnie Sc_t dla l.2.6c	D/Ru^* dla Sc_t jak w l.2.6a	średnie Sc_t dla l.2.6a
Wyniki na podstawie pomiarów M. V. Zagaroli										
31577	7,97	6,58	0,825	6,98	0,875	6,65	5,50	0,828	5,79	0,872
41727	8,66	7,14	0,824	7,59	0,876	7,62	6,29	0,826	6,65	0,873
56677	8,77	7,23	0,824	7,69	0,876	8,37	6,90	0,825	7,33	0,876
74293	8,82	7,27	0,824	7,74	0,877	8,12	6,70	0,825	7,10	0,875
98811	8,76	7,21	0,823	7,68	0,877	8,38	6,90	0,824	7,34	0,876
145790	8,50	6,99	0,822	7,47	0,879	8,02	6,60	0,823	7,03	0,877
185430	8,32	6,83	0,822	7,31	0,879	8,02	6,61	0,823	7,04	0,877
230460	8,18	6,72	0,822	7,19	0,879	7,79	6,42	0,823	6,84	0,877
309500	7,85	6,46	0,822	6,90	0,879	7,28	6,00	0,824	6,39	0,877
409290	7,72	6,34	0,821	6,79	0,879	7,21	5,93	0,823	6,33	0,878
539090	7,64	6,27	0,821	6,72	0,880	7,09	5,84	0,823	6,22	0,877
751820	7,67	6,30	0,822	6,75	0,879	7,27	5,99	0,823	6,38	0,877
1023800	7,60	6,24	0,821	6,69	0,879	6,97	5,74	0,824	6,11	0,876
1340400	7,60	6,25	0,822	6,68	0,879	7,15	5,89	0,824	6,27	0,877
1787500	7,80	6,41	0,822	6,86	0,879	7,20	5,94	0,824	6,31	0,876
2345000	7,71	6,34	0,822	6,77	0,878	7,28	6,00	0,824	6,38	0,876
3098100	7,63	6,28	0,823	6,70	0,878	7,40	6,10	0,823	6,50	0,877
4420300	7,63	6,27	0,822	6,70	0,879	7,41	6,09	0,823	6,50	0,878
6072700	7,71	6,34	0,822	6,77	0,879	7,51	6,18	0,823	6,59	0,878
7714700	7,83	6,44	0,823	6,87	0,878	7,51	6,18	0,824	6,58	0,877
10249000	7,84	6,45	0,822	6,88	0,878	7,62	6,27	0,823	6,69	0,878
13598000	7,83	6,44	0,822	6,88	0,878	7,62	6,27	0,823	6,69	0,878
18196000	7,45	6,13	0,823	6,53	0,877	7,32	6,02	0,823	6,43	0,878
23977000	7,43	6,12	0,824	6,51	0,876	7,47	6,14	0,823	6,56	0,878
29927000	7,50	6,17	0,823	6,58	0,877	7,34	6,04	0,823	6,44	0,877
35259000	7,62	6,28	0,824	6,68	0,877	7,41	6,10	0,824	6,49	0,877
Wyniki na podstawie pomiarów J. Laufera										
41294						8,50	7,00	0,823	7,47	0,878
428963						7,57	6,15	0,813	6,72	0,888

Jak widać, wyniki dla obu profili $Sc_t(\xi)$ są porównywalne. Wynika to głównie stąd, iż zasadniczy wkład do zjawiska dyspersji, co wynika z obserwacji uwidocznionej na Rys.6 przebiegu funkcji podcałkowej, mają obszary, dla których wartości $Sc_t(\xi)$ dla obu uwzględnionych modeli empirycznych są podobne. Zasadnicze różnice zachodzą dla warstw bliskich opływanej ściany, których wkład do efektu dyspersji jest znikomy. Przyczyną niewielkiej różnicy współczynnika dyspersji dla obu profili $Sc_t(\xi)$ może być arbitralne przyjęcie pełnego zakresu profilu zmierzonego przez Koeltzsch, rozciągającego się na cały obszar warstwy przyściennej. Jak wiadomo, dla przepływu w przewodzie zamkniętym nie mamy pełnej warstwy przyściennej (a ściślej mówiąc, nie mamy obszaru przepływu swobodnego, do którego ta warstwa się rozciąga), a zatem należałoby przeskalować profil Koeltzsch, tak aby sięgnąć tylko do wartości $Sc_t(\xi)$ w osi przewodu, równej około 0,6, a nie 0,4. Błąd jednak jest niewielki, gdyż, jak również widać z przebiegu funkcji podcałkowej, także obszar przyosiowy nie ma znacznego udziału w tworzeniu efektu dyspersji.

Warto również zauważyć fakt, iż uśrednione wartości Sc_t (liczone jako iloraz wartości współczynnika dyspersji dla zmiennego profilu $Sc_t(\xi)$ i dla $Sc_t=1$) są prawie stałe w porównaniu ze zmiennością współczynnika dyspersji w postaci bezwymiarowej. Nie jest to efekt oczywisty, gdyż jeden z parametrów kształtu profilu prędkości i profilu kinematycznego współczynnika lepkości turbulentnej (które to parametry powodują zmienność otrzymanych wartości D/Ru^*), współczynnik mocy śladu Π , jest parametrem całki $I(\Pi)$ we wzorze II.2.12. Pewnym wyjaśnieniem zaistniałego faktu może być przypuszczenie, że głównym powodem zmienności całki $I(\Pi)$ jest profil kinematycznego współczynnika lepkości turbulentnej $v_t(\xi)$, również zależny od parametru Π , a zatem powodujący zmiany wartości D/Ru^* . Profil ten, jak widać na Rys. 5, w zmodyfikowanym modelu logarymiczno-śladowym dla wartości ξ większych od 0,3 zmienia się bardzo wolno i asymptotycznie zbliża się do wartości stałej w osi rury (zależnej jednak od parametru Π). Jak zostało to już wcześniej zauważone, zasadniczy wkład do zjawiska dyspersji mają obszary, dla których bezwymiarowa odległość od ściany ξ

jest większa od 0,3. Tak więc wzajemny splot profilu prędkości i profilu kinematycznego współczynnika lepkości turbulentnej powoduje taki nieoczywisty efekt.

Uzupełnienie 4

W związku z powyższymi poprawkami i uzupełnieniami, uzupełnić należy również spis literatury o następujące pozycje:

- J. W. Birkett, M. N. Jones, N. D. Bryan, F. R. Livens *The effects of solution conditions on partial specific volumes of humic substances*, "Analytica Chimica Acta", Vol. 362, Issues 2–3, 4 May 1998, pp. 299–308.
- J. O. Hinze *Turbulence: An introduction to its mechanism and theory*, McGraw–Hill Series in Mechanical Engineering, McGraw–Hill, New York 1975; rozdział 7: "Transport of a scalar quantity in wall turbulence".
- K. Koeltzsch *The height dependence of the turbulent Schmidt number within the boundary layer*, "Atmospheric Environment", Vol. 34, Issue 7, 2000, pp. 1147–1151.
- G. Kramm, R. Dlugi, and N. Mölders *Sublayer-Stantonnumbers of heat and matter for aerodynamically smooth surfaces: basic considerations and evaluation*, "Meteorology and Atmospheric Physics", Vol. 79, Nr. 3–4, April 2002, pp. 173–194.
- B. E. Launder *Heat and Mass Transport* [rozdział 6 w:] P. Bradshaw [red.] *Topics in Applied Physics, Volume 12: Turbulence*, Springer–Verlag, Berlin 1978.
Poradnik fizykochemiczny, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa 1974.