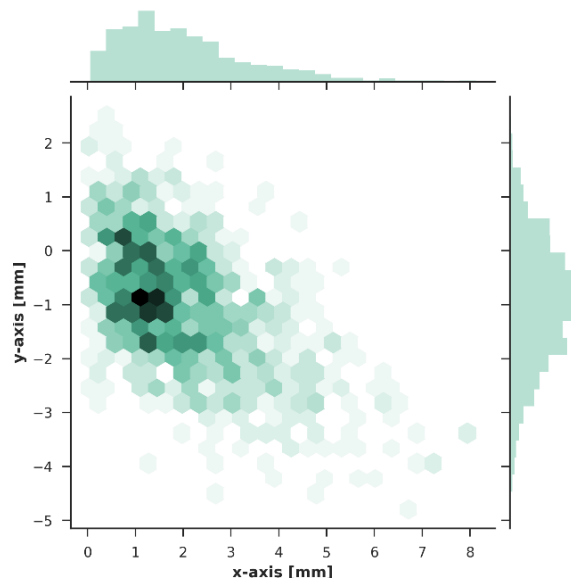


ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΟΥ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ

ΑΝΑΛΥΣΗ ΔΙΑΣΠΟΡΑΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΣΕ ΔΙΣΔΙΑΣΤΑΤΟ ΠΟΡΩΔΕΣ ΜΕΣΟ ΜΕ ΤΗΝ
ΧΡΗΣΗ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ ΤΩΝ ΡΟΠΩΝ.

ANALYSIS OF DISPERSION OF PARTICLE TRANSPORT IN TWO-DIMENSIONAL
POROUS MEDIA BY THE METHOD OF MOMENTS.



Διπλωματική Εργασία
που υποβλήθηκε στη
Σχολή Μηχανικών Περιβάλλοντος
Από τον
ΓΕΩΡΓΙΟ ΠΑΜΦΙΛΗ
Προπτυχιακό Φοιτητή

ΧΑΝΙΑ, 2018

ΑΝΑΛΥΣΗ ΔΙΑΣΠΟΡΑΣ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΣΕ ΔΙΣΔΙΑΣΤΑΤΟ ΠΟΡΩΔΕΣ ΜΕΣΟ ΜΕ ΤΗ
ΧΡΗΣΗ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ ΤΩΝ ΡΟΠΩΝ.

ANALYSIS OF DISPERSION OF PARTICLE TRANSPORT IN TWO-DIMENSIONAL
POROUS MEDIA BY THE METHOD OF MOMENTS.

ΓΕΩΡΓΙΟΣ ΠΑΜΦΙΛΗΣ

ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ:

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ:

ΧΡΥΣΙΚΟΠΟΥΛΟΣ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ,

ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΣΧΟΛΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟΥ ΚΡΗΤΗΣ

ΜΕΛΗ:

ΚΑΡΑΤΖΑΣ ΓΕΩΡΓΙΟΣ,

ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΣΧΟΛΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟΥ ΚΡΗΤΗΣ

ΠΕΤΡΟΣ ΓΚΙΚΑΣ,

ΑΝΑΠΛΗΡΩΤΗΣ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ ΣΧΟΛΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟΥ

ΚΡΗΤΗΣ

ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ ΕΞΕΤΑΣΗΣ: 12/10/2018

Ευχαριστίες

Η παρούσα διπλωματική εργασία, με τίτλο “Ανάλυση Διασποράς Σωματιδίων Σε -Δισδιάστατο Πορώδες Μέσο Με Τη Χρήση Της Μεθόδου Των Ροπών.”, εκπονήθηκε στο σύνολό της στο Εργαστήριο Τεχνολογίας του Περιβάλλοντος της Σχολής Μηχανικών Περιβάλλοντος του Πολυτεχνείου Κρήτης, κατά το ακαδημαϊκό έτος 2018, υπό την επίβλεψη του Καθηγητή κ. Κωνσταντίνου Χρυσικόπουλου.

- Αρχικά θα ήθελα να ευχαριστήσω τον πατέρα μου που μου έμαθε πως να είμαι εργατικός και σωστός ως προς τον εαυτό μου και την κοινωνία και πάρα το γεγονός που τον έχασα πολύ πρόσφατα τα μαθήματα αυτά δεν θα ξεχαστούν ποτέ.
- Θα ήθελα να ευχαριστήσω την μητέρα μου και τον αδερφό μου για την συμπαράσταση και την προσπάθεια που έχουν καταβάλει αυτά τα δυο χρόνια, μετακομίζοντας στην Αμερική και δουλεύοντας σκληρά ώστε να επανέλθουμε σε φυσιολογικούς ρυθμούς.
- Θα ήθελα να ευχαριστήσω την θεία μου την Έλλη και τον θείο μου τον Ιγνάτιο που με φιλοξένησαν στο σπίτι τους για τα δυο εκείνα χρόνια από το 2008 έως το 2010. Δίνοντάς μου την δυνατότητα να μπω στο πολυτεχνείο και να λάβω μια διετή εκπαίδευση που εμπειρείχε διαγωνισμούς ρομποτικής και θεατρικές ομάδες κάτι που δυστυχώς δεν θα μου πρόσφερε η Ικαρία.
- Θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια του πατέρα μου και από την πλευρά των Ξενάκη και Παμφίλη για την στήριξη και βοήθεια που μου παρείχαν σε διάφορες οικογενειακές υποθέσεις.
- Την Ευγενία Οικονομοπούλου που πάντα με στηρίζει, με βοηθάει και με προσέχει.
- Την παρέα μου στα Χανιά, τον Γιάννη Πετίδη, Ελισάβετ Τσέκερη, Θωμά Δασκαλάκη, Μαρικίτα Λυρώνη, Ιωάννα Ανυφαντή, Υρώ Μπίσδα, Χάρη Λούκα, Μαρία Γεωργοπούλου, Μανούσο Πρωιμάκη, Φώτη Κωσταρέλο για την φιλία και στήριξή τους.
- Τους μουσικούς μου φίλους Παναγιώτη Πετρόπουλο, Σωκράτη Πιζάνη, Δημήτρη Σαρηγιαννίδη και την Ευφροσύνη Κοσσυβάκη για τα μουσικά μας ξενύχτια.
- Την μουσικό-θεατρική ομάδα passe-partout, και τους δημιουργούς της Γιάννη Γιαννακάκη, Τίτο Σμυρνάκη και Γιώργο Πογιατζή που μου παρείχαν μια καλλιτεχνική στέγη για όσον καιρό ήμουνα εκεί.

- Τον Βασίλειο Κατζουράκη για την καθοδήγηση του κατά την εκπόνηση της διπλωματικής αυτής εργασίας και την απασφαλμάτωση κώδικα όσων αφορά τις χρονικές ροπές.
- Και τελικά θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή μου Κωνσταντίνο Χρυσικόπουλο για την έμπνευση του καθώς και την υπομονή που έχει δείξει αυτά τα χρόνια.

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες.....	3
Περιεχόμενα.....	5
Κατάλογος Σχημάτων	7
Περίληψη	9
Abstract.....	9
1. Εισαγωγή.....	10
2. Βασικές Έννοιες Μεταφοράς Μάζας.....	12
2.1 Διάχυση (Diffusion).....	12
2.1.1 Φυσική εξήγηση του φαινομένου μοριακής διάχυσης.....	12
2.1.2 Πρώτος Νόμος του Fick.....	13
2.1.2.1 Πρώτος Νόμος του Fick για την διάχυση δύο αερίων.....	14
2.1.2.2 Πρώτος Νόμος του Fick για την διάχυση αερίου εντός στερεού.....	15
2.1.3 Δεύτερος Νόμος του Fick	17
2.1.4 Αποτελεσματική διάχυση (effective diffusion).....	18
2.1.5 Εξίσωση συντελεστή μοριακής διάχυσης σε υγρά	19
2.2 Μεταγωγή (Advection).....	20
2.3 Μηχανική Διασπορά (Mechanical Dispersion).....	21
2.4 Υδροδυναμική Διασπορά (Hydrodynamic Dispersion).....	22
3. Στατιστική.....	24
3.1 Αναμενόμενη Τιμή.....	24
3.2 Διακύμανση Τυχαίας Μεταβλητής	25
4. Ανάλυση Ροπών.....	26
4.1 Χωρικές Ροπές	26
4.1.1 Χωρική ροπή n τάξης.....	27
4.1.2 Χωρική ροπή 0 ^{ης} τάξης	27
4.1.3 Χωρική ροπή 1ης τάξης.....	28
4.1.3.1 Ταχύτητα του πλουμίου	28
4.1.4 Χωρική ροπή 2 ^{ης} τάξης	28
4.1.5 Διακύμανση του ρύπου	28
4.2 Χρονικές Ροπές.....	29
4.3 Υπολογισμός υδροδυναμικής διασποράς σωματιδίων.....	29
4.4 Υπολογισμός τάσης διασποράς σωματιδίων.....	30

5. Μοντελοποίηση Προβλήματος	31
5.1 Υπολογισμός πεδίου ροής.....	31
5.2 Μεταφορά Σωματιδίων	34
5.3 Μέθοδοι επίλυσης.....	37
5.4. Κατασκευή εικονικού πορώδους μέσου	38
6. Προσομοιώσεις	39
7. Αποτελέσματα-Συζήτηση	40
8. Συμπεράσματα	50
Βιβλιογραφία	51
Βιβλιογραφία Διαδικτυακή.....	54
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ	55
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α: Κώδικας για την δημιουργία του πορώδους μέσου.....	55
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β: Κώδικας υπολογισμού των στατιστικών ροπών.....	59
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Γ: Ρυθμίσεις προγράμματος COMSOL (ροή ρευστού)	62
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Γ: Ρυθμίσεις προγράμματος COMSOL (μεταφορά σωματιδίων).....	65
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Δ: Κώδικας επίλυσης δεύτερου νόμου του Fick (παράδειγμα).....	69

Κατάλογος Σχημάτων

Σχήμα 1: Διάχυση από σημειακή πηγή. Παρατηρείται ότι η ουσία απλώνεται ακτινικά γύρω από την σημειακή πηγή. Η παράμετρος s αντιπροσωπεύει την απόσταση που διανύει η ουσία που διαχέεται και J είναι η παροχή μάζας της ουσίας με κατεύθυνση προς αυτή μικρότερης συγκέντρωσης [Batu, 2005].	13
Σχήμα 2: Δυο αέρια A και B πριν αφαιρεθεί η διαχωριστική μεμβράνη/εμπόδιο. Παρατηρείται ότι τα δυο αέρια δεν έχουν αναμειχθεί και το διαχωριστικό μέσο είναι αδιαπέρατο.....	14
Σχήμα 3: Παρατηρούμε ότι τα αέρια A και B μετά από κάποιο χρονικό διάστημα αναμιγνύονται πλήρως και δεν μπορούν να διαχωριστούν πλέον από μόνα τους. Η κλίση συγκεντρώσεων των αερίων έχει ισορροπήσει σε κάθε σημείο του δοχείου.....	14
Σχήμα 4: Στα παραπάνω υπό-διαγράμματα παρατηρούμε την εξέλιξη της κλίσης της συγκέντρωσης συναρτήσει του χρόνου για την διάχυση του ηλίου εντος του ξύλου [Bird et al., 2002].	16
Σχήμα 5: Εδώ αναπαρίσταται ένα ισοζύγιο μάζας για έναν μοναδιαίο όγκο. Η παροχή μάζας στην είσοδο του όγκου αυτού είναι διαφορετική από αυτή της εξόδου. Έτσι μπορεί να εξαχθεί και ο δεύτερος νόμος του Fick.....	17
Σχήμα 6: Αναπαράσταση διαδρομής σωματιδίου σε ένα πορώδες μέσο. Το L_t το οποίο είναι το πραγματικό μήκος της διαδρομής του σωματιδίου είναι μεγαλύτερο από εκείνο της χαρακτηριστικής διαδρομής, L_c . Αυτός είναι ο κύριος λόγος της διαφοροποίησης της αποτελεσματικής διάχυσης με αυτήν της μοριακής ως $De < D$	18
Σχήμα 7: Εδώ παρατηρούμε το φαινόμενο της μεταγωγής. Ο ρύπος κινείται εμβολικά εντός του μέσου και δεν μεταβάλλεται το σχήμα του πλουμίου με το χρόνο.....	20
Σχήμα 8: Εδώ παρατηρείται το φαινόμενο της μηχανικής διασποράς. Βλέπουμε ότι τα σωματίδια ακολουθούν διαφορετικές τροχιές και καταλήγουν σε χρόνο $t + \Delta t$ να μην είναι ευθυγραμμισμένα ως προς την κύρια ροή. [Batu, 2005].....	21
Σχήμα 9: Αδιάστατος διαμήκης συντελεστής υδροδυναμικής διασποράς DL/D συναρτήσει του αδιάστατου αριθμού Peclet [Batu, 2005, p62].....	23
Σχήμα 10: Κατανομή μίας τυχαίας μεταβλητής x	24
Σχήμα 11: Δύο κατανομές με διαφορετικές διακυμάνσεις.....	25
Σχήμα 12: Εδώ παρατηρείται η κατανομή των σωματιδίων σε ένα δισδιάστατο μέσο κατά την διεύθυνση x, y σε κάποιο χρόνο t	26
Σχήμα 13: Εδώ παρουσιάζεται ένα τμήμα του δισδιάστατου πορώδους μέσου στο οποίο έχουν επιλυθεί η εξισώσεις ροής του ρευστού. Στο δεξιό μέλος του σχήματος παρουσιάζεται η χρωματική αντιστοίχιση του μέτρου του πεδίου ταχυτήτων.	31
Σχήμα 14: Ορισμός εισόδου του ρευστού στο πορώδες μέσο.	32
Σχήμα 15: Ορισμός εξόδου του ρευστού από το πορώδες μέσο.....	33
Σχήμα 16: Πεδίο ροής εντός του πορώδους μέσου. Παρατηρείται ότι είναι σχετικά ομοιόμορφη χωρίς έντονες γραμμές ροής. Ο άξονας x αναπαριστά την κατεύθυνση της κύριας ροής, διαμήκης κατεύθυνση, και αυτός του y θεωρείται η εγκάρσια διάσταση. Δεξιά παρουσιάζεται ο κώδικας των χρωμάτων του πεδίου.....	34
Σχήμα 17: Κατανομή σωματιδίων μετά από χρόνο 2 min στο ευθύγραμμο τμήμα της εισόδου του πορώδους μέσου. Παρατηρείται ότι η ταχύτητες διαφέρουν από σωματίδιο σε σωματίδιο, χρωματική διαφορά.....	36
Σχήμα 18: Διακριτοποίηση του πορώδους μέσου χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα προσομοίωσης.	37
Σχήμα 19: Αρχική εικόνα του πορώδους μέσου αφού εισάχθηκε και αφαιρέθηκαν τα στρώματα ενδιαφέροντος.....	38

Σχήμα 20: Οι παραπάνω σιγμοειδής καμπύλες αναπαριστούν τον αριθμό των σωματιδίων που παραμένουν στο πορώδες μέσο ανά χρόνο και διάμετρο σωματιδίου.....	41
Σχήμα 21: Εδώ αναπαριστώνται οι καμπύλες εξόδου (breakthrough curves) των σωματιδίων από το πορώδες μέσο. Ξεκινά μετά τα 1200 min και τελειώνει γύρω στα 2400 min. Ο άξονας y αναπαριστά τον αριθμό σωματιδίων Np που εξέρχονται ανά κάθε χρονική στιγμή από το πορώδες.	42
Σχήμα 22: Θηκογράμματα επίδρασης της διαμέτρου των σωματιδίων στο μέσο χρόνο παραμονής τους, 1η κανονικοποιημένη χρονική ροπή. Παρατηρείται μια γραμμική αύξηση συναρτήσει της διαμέτρου.....	43
Σχήμα 23: Στο παραπάνω σχήμα παρουσιάζονται διάφορα θηκογράμματα τα οποία εκφράζουν την μέση ταχύτητα του πλουμίου εντός του πορώδους. Το καθένα από αυτά αντιστοιχεί και σε διαφορετική διάμετρο σωματιδίου. Επίσης το καθένα κατασκευάστηκε χρησιμοποιώντας προσομοιώσεις που έκαναν χρήση τους τυχαίους σπόρους.	44
Σχήμα 24: Εδώ παρατηρείται η μεταφορά του πλουμίου κατά την διεύθυνση της κύριας ροής, x . Αυτή η μεταφορά υπολογίστηκε χρησιμοποιώντας την πρώτη κανονικοποιημένη χωρική ροπή. Κάθε μια ευθεία αντιστοιχεί και σε μία διάμετρο σωματιδίου.	45
Σχήμα 25: Εδώ παρουσιάζονται οι 2 ^{ης} τάξης κανονικοποιημένες χωρικές ροπές ως προς την διεύθυνση κύριας ροής. Κάθε μία καμπύλη αντιπροσωπεύει και μία διάμετρο σωματιδίου.....	46

Περίληψη

Στην παρούσα μελέτη αναλύθηκε με την χρήση προσομοιώσεων η μεταφορά κολλοειδών σε 2-Διάστατο μοντέλο ενός πορώδους μέσου, χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα COMSOL MULTIPHYSICS. Αρχικά χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο υπολογιστικής υδροδυναμικής (CFD module) για την επίλυση της ενδοπορώδους ροής και στην συνέχεια απελευθερώθηκαν 2000 κολλοειδή σωματίδια στην είσοδο του μέσου χρησιμοποιώντας το σωματιδιακό μοντέλο (Particle Tracing for Fluid Flow module) για να καταγραφούν οι θέσεις τους κατά την διάρκεια της προσομοίωσης. Στη συνέχεια εφαρμόστηκε η ανάλυση ροπών χωρικά και χρονικά ώστε να υπολογιστούν οι παράμετροι διασποράς και οι συντελεστές τους. Η διαδικασία αυτή επαναλήφθηκε πολλαπλές φορές αλλάζοντας τις διαμέτρους των κολλοειδών. Τέλος, παρουσιάζεται η συσχέτιση μεταξύ διαμέτρου και διασποράς.

Abstract.

In this study, we investigated numerically the transport of colloids in a two-dimensional model porous medium, using the commercial Multiphysics program COMSOL[®]. Initially, by using the “Computational Fluid Dynamics module” (CFD module) we computed the steady-state velocity field within a pre-specified porous medium. After 2000 particles with known diameter and density were released within the porous medium, as a uniform distributed inlet source, the “Particle Tracing for Fluid flow module” was employed in order to follow the migration of each individual particle within the porous medium. Subsequently, the temporal and spatial moments of the dispersed colloids within the two-dimensional porous medium where computed. This procedure was repeated several times by releasing colloid particles with various particle diameters. Finally, correlation describing the dependency of colloid particle-size to dispersivity was determined.

1. Εισαγωγή

Η τύχη ρυπογόνων ουσιών στο υπέδαφος έχει τραβήξει την προσοχή της επιστημονικής κοινότητας τα τελευταία χρόνια, καθώς αναγνωρίζεται όλο και περισσότερο η αξία των υπογείων υδροφορέων, που συχνά δρουν σαν δεξαμενές πόσιμου νερού. Η μόλυνση τους με παθογόνους μικροοργανισμούς ή με άλλες ρυπογόνες ουσίες έχει τεράστιες συνέπειες για το άνθρωπο. Για να είμαστε σε θέση να αποφανθούμε για την τύχη διαλυτών και μη διαλυτών ρύπων, μια εκτενέστερη ανάλυση πρέπει να γίνει στους ρύπους που ανήκουν στην νάνο κλίμακα, όπως είναι τα κολλοειδή. Τα κολλοειδή ακόμα και όταν δεν δρουν σαν μολυσματικοί παράγοντες μπορούν να συνεισφέρουν στην εξάπλωση άλλων ρύπων (π.χ. ιών, βιοκολλοειδών) διαμέσου του φαινομένου της συμμεταφοράς στο οποίο μικρότεροι ρύποι (π.χ. βακτήρια) μπορούν και προσκολλώνται στην επιφάνεια μεγαλύτερων και πιο γρήγορων σωματιδίων (π.χ. άργιλοι) και τελικώς να μεταφέρονται μαζί. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τα κολλοειδή να δρουν ως καταλύτες εξάπλωσης παθογόνων ρύπων. Η μεταφορά αδενοϊών με την χρήση νάνο σωματιδίων εξετάστηκε από τους [Vasiliki I. Syngouna et. al., 2017] και έδειξαν σημαντική κατακράτηση μάζας ιών χρησιμοποιώντας οξείδιο του τιτανίου. Αυτό οδήγησε στο συμπέρασμα ότι τα κολλοειδή θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν και σε αμμόφιλτρα φίλτρα νερού για την κατακράτηση παθογόνων ιών. Εκτός από αυτό, η επίδραση της βαρύτητας στην μεταφορά των κολλοειδών και η ρόφησή τους στην στερεά μήτρα αναλύθηκε από τους [Chrysikopoulos et. al., 2014] και έδειξαν ότι υπήρχαν διαφορές στην κατακράτηση τους καθώς άλλαζε ο προσανατολισμός της στήλης και της ροής ως προς της διεύθυνσης της βαρύτητας. Καθώς και ότι υπήρχαν διαφοροποιήσεις στις ταχύτητες των σωματιδίων εξαιτίας αυτού. Συχνά το μέγεθος των κολλοειδών εμποδίζει την είσοδο τους σε πόρους μικρότερους από την διάμετρό τους, οδηγώντας τα έτσι να ακολουθούν όχι ευθύγραμμες αλλά δαιδαλώδεις τροχιές εντός του πορώδους μέσου. Αυτός ο μηχανισμός αυξάνει την διασπορά τους και αλλοιώνει τα χαρακτηριστικά μεταφοράς τους. Συνεπώς είναι αναμενόμενο η μεταφορά σωματιδίων να έχει διαφορετική εξέλιξη από την μεταφορά διαλυτών ρύπων [Chrysikopoulos and Abdel-Salam, 2003]. Αυτό έχει αποδειχθεί και πειραματικά: οι καμπύλες εξόδου των δεικτών δεν αντιστοιχούν σε αυτές των κολλοειδών σωματιδίων [Chrysikopoulos and Katzourakis, 2015]. Η σχέση μεγέθους-διασποράς ως προς την διαμήκη κατεύθυνση έχει εξετασθεί από τους Chrysikopoulos and Katzourakis (2015). Μετά από πολυπληθή πειράματα συμπέραναν ότι υπάρχει μια θετική σχέση μεταξύ των δύο αυτών παραμέτρων. Τέλος για την περίπτωση της

εγκάρσια διασποράς, αυτή φαίνεται να διαδραματίζει ένα μικρότερο ρόλο στην συνολική μεταφορά των ρύπων. Όμως δεν θα πρέπει να θεωρείται αμελητέα η συμβολή της καθώς όπως αναφέρεται στην βιβλιογραφία, ελέγχει την μεταφορά του πλουμίων των NAPLs [Chrysikopoulos et al., 1994]. Στην παρούσα διπλωματική εργασία θα εκτιμηθεί η σχέση μεγέθους κολλοειδούς σωματιδίου και τάσης διασποράς. Για να επιτευχθεί αυτό γίνεται υπολογισμός της υδροδυναμικής διασποράς και της τάσης διασποράς σωματιδίων κατά την κατεύθυνση κύριας ροής, ενώ στην συνέχεια πραγματοποιείται ανάλυση χωρικών και χρονικών ροπών. Η ανάλυση ροπών είναι μια στατιστική ανάλυση πιθανοτικών κατανομών και στην παρούσα περίπτωση θα χρησιμοποιηθεί για την ανάλυση της κατανομής των σωματιδίων στο χρόνο και στον χώρο κατά την κύρια διεύθυνση ροής. Η ανάλυση αυτή γίνεται με το πρόγραμμα προσομοίωσης COMSOL το οποίο θα επιλύσει της διάφορες τροχιές των σωματιδίων χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων για να σχηματίσει ένα πεδίο ροής σε ένα εικονικό πορώδες μέσο και αργότερα να επιλύσει της τροχιές των σωματιδίων στο χρόνο. Η ανάλυση ροπών έχει χρησιμοποιηθεί από τους [James et al., 2011] για την ανάλυση μονοδιασπειρόμενης και πολυδιασπειρόμενης μεταφοράς κολλοειδών σε κορεσμένους ρωγματοειδής σχηματισμούς ώστε να εξάγουν συμπεράσματα σχετικά με την επίδραση της βαρύτητας και τον προσανατολισμό της ρωγμής. Επίσης έχει χρησιμοποιηθεί από τους [Chrysikopoulos and Katzourakis, 2015] για την ανάλυση των κολλοειδών σωματιδίων στην έξοδο της στήλης, υπολογίζοντας το μέσο χρόνο παραμονής, την διακύμανση της κατανομής των σωματιδίων καθώς και την ταχύτητα του πλουμίου. Οι εφαρμογές της παρούσας ανάλυσης θα μπορούσαν να εφαρμοστούν στο πεδίο χρησιμοποιώντας ψηφιοποιημένα δείγματα εδάφους με την χρήση μαγνητικής τομογραφίας ή άλλης μεθόδου. Στη συνέχεια θα μπορούσε να γίνει προσομοίωση μεταφοράς κολλοειδών στο μέσο αυτό εξάγοντας τις παραμέτρους υδροδυναμικής διασποράς και των τάσεων της για αυτά τα εδαφικά δείγματα. Τέλος, στην παρούσα μελέτη η σχέση μεταξύ μεγέθους κολλοειδούς και τάσης διασποράς αναμένεται να είναι θετική. Δηλαδή καθώς αυξάνεται το μέγεθος του κολλοειδούς σωματιδίου θα αυξάνεται επίσης και η τάση διασποράς κατά την κατεύθυνση της κύριας ροής.

2. Βασικές Έννοιες Μεταφοράς Μάζας

2.1 Διάχυση (Diffusion)

Το φαινόμενο της διάχυσης μπορεί να παρατηρηθεί πολύ εύκολα μέσω ενός απλού πειράματος. Σε ένα ποτήρι νερό ρίχνεται μία σταγόνα μελανιού. Στην αρχή παρατηρείται ότι υπάρχει εμφανής διαχωρισμός μεταξύ της σταγόνας του μελανιού και του νερού, μετά όμως από κάποιο χρονικό διάστημα ο διαχωρισμός φάσεων παύει να υπάρχει και το ποτήρι με το νερό θα αποκτήσει απόχρωση ίδια με αυτή του μελανιού. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται μοριακή διάχυση και ο μηχανισμός μεταφοράς παθητική μεταφορά. Το φαινόμενο αυτό όπως παρατηρείται, μπορεί να συμβαίνει όταν το νερό είναι σε κατάσταση ηρεμίας.

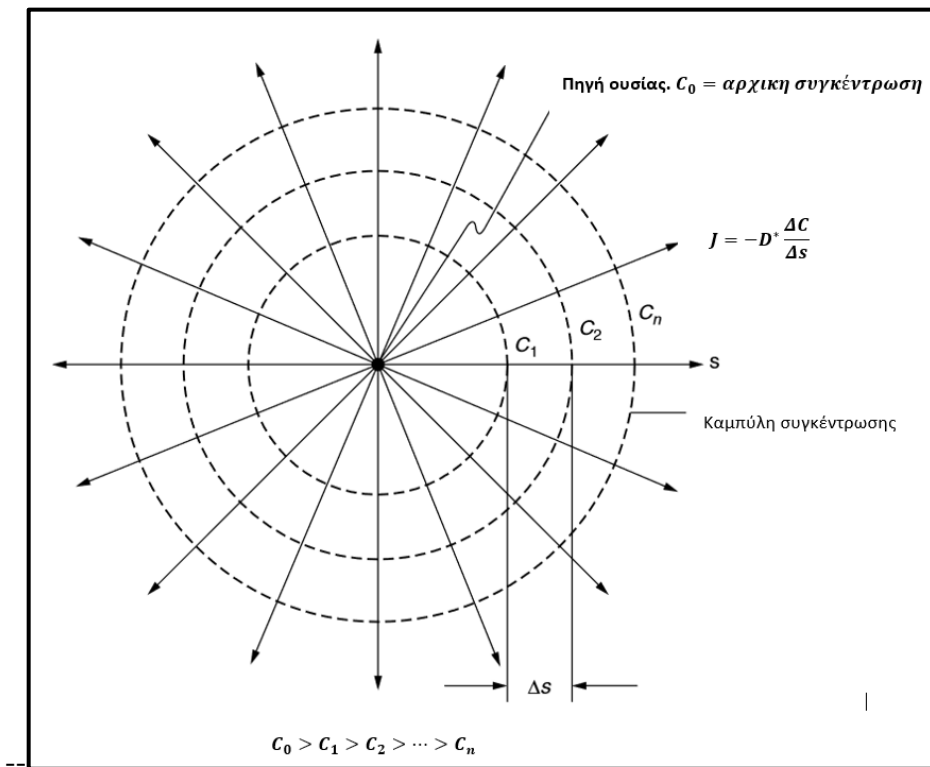
2.1.1 Φυσική εξήγηση του φαινομένου μοριακής διάχυσης.

Τα σωματίδια ενός ρευστού υπάγονται σε τυχαίες κινήσεις και συγκρούσεις, το φαινόμενο αυτό ονομάζεται κίνηση Brown. Αν θεωρήσουμε ένα μίγμα δυο υγρών A και B, επειδή τα υγρά αυτά έχουν διαφορετικά χαρακτηριστικά, αναμένεται ότι οι μηχανικές ιδιότητες των συγκρούσεων μεταξύ των ζευγών A-A, A-B και B-B να μην είναι ίδιες. Αν οι συγκεντρώσεις των υγρών A και B είναι ομογενείς, κάθε ένα σωματίδιο A θα έχει τον ίδιο μέσο αριθμό συγκρούσεων ανά χρόνο με κάποιο άλλο σωματίδιο A ή B. Αν οι συγκεντρώσεις όμως δεν είναι ομογενείς μιας ουσίας A, μία ζώνη υψηλής συγκέντρωσης θα έχει διαφορετικές μηχανικές ιδιότητες από αυτή μίας ζώνης χαμηλότερης συγκέντρωσης. Λόγω αυτής της ανισορροπίας συγκεντρώσεων τα σωματίδια θα μπορούν να μεταφερθούν από ζώνες υψηλής συγκέντρωσης σε ζώνες χαμηλής. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται μοριακή διάχυση. Η παθητική μεταφορά σε εδάφη και υπόγειους υδροφορείς τείνει να μειώνει την υπάρχουσα κλίση συγκεντρώσεων. Αν το διάλυμα ουσιών κινείται εντός κάποιου πορώδους μέσου μπορεί η παθητική μεταφορά να γίνει μέρος της υδροδυναμικής διασποράς.

2.1.2 Πρώτος Νόμος του Fick

Για να ποσοτικοποιηθεί η διαχυτότητα μίας ουσίας πρέπει να εξαχθεί μια σχέση μεταξύ της ροής μάζας ανά μονάδα επιφάνεια (παροχή μάζας, mass flux), $J \left[\frac{M}{tL^2} \right]$, και της κλίσης συγκέντρωσης $\frac{\Delta C}{\Delta s} \left[\frac{M/L^3}{L} \right]$ όπου C η συγκέντρωση και s η απόσταση. Ο Adolf E. Fick (1829 έως 1901) παρατήρησε την αναλογία μεταξύ της μοριακής διάχυσης και της μεταφοράς θερμότητας με αγωγή. Ο Fick θεώρησε ότι ο ρυθμός μεταφοράς της διαχεόμενης ουσίας μέσω μίας μοναδιαίας επιφάνειας είναι ανάλογος ως προς την κλίση συγκέντρωσης $J \propto \frac{\Delta C}{\Delta s}$. Εισάγοντας και μία σταθερά αναλογίας D^* λαμβάνουμε την σχέση [Batu, 2015]:

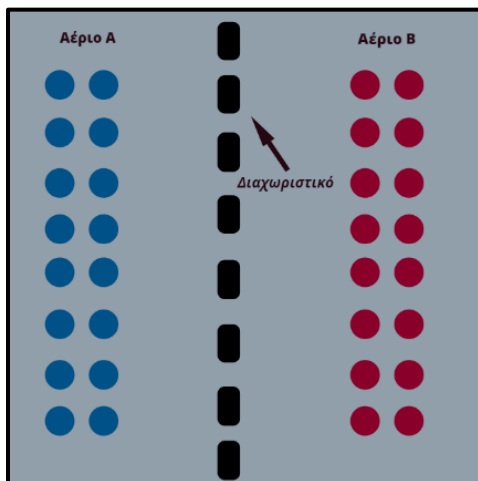
$$J = -D^* \frac{\Delta C}{\Delta s} \rightarrow J = -D^* \frac{C_2 - C_1}{\Delta s} \quad (2.1)$$



Σχήμα 1: Διάχυση από σημειακή πηγή. Παρατηρείται ότι η ουσία απλώνεται ακτινικά γύρω από την σημειακή πηγή. Η παράμετρος s αντιπροσωπεύει την απόσταση που διανύει η ουσία που διαχέεται και J είναι η παροχή μάζας της ουσίας με κατεύθυνση προς αυτή μικρότερης συγκέντρωσης [Batu, 2005].

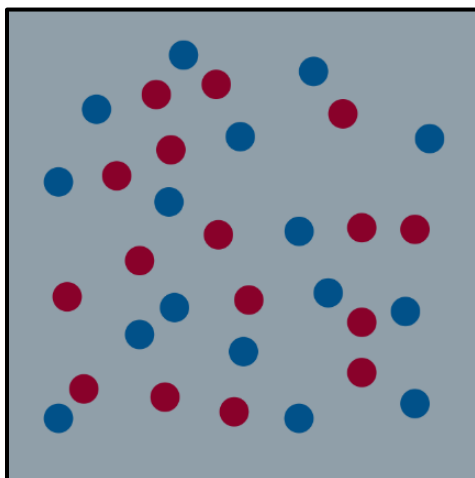
2.1.2.1 Πρώτος Νόμος του Fick για την διάχυση δύο αερίων.

Θεωρείται ότι υπάρχει ένα δοχείο με δύο αέρια, A και B. Το δοχείο αυτό διατηρείται σε συγκεκριμένη θερμοκρασία και πίεση. Τα αέρια αυτά είναι διαχωρισμένα στην αρχή με κάποιο διαχωριστικό στρώμα (βλέπε **Σχήμα 2**) ώστε να μην αναμιχθούν όπως παρουσιάζεται στο .



Σχήμα 2: Δυο αέρια A και B πριν αφαιρεθεί η διαχωριστική μεμβράνη/εμπόδιο. Παρατηρείται ότι τα δυο αέρια δεν έχουν αναμειχθεί και το διαχωριστικό μέσο είναι αδιαπέρατο.

Μόλις αφαιρεθεί η διαχωριστική αυτή επιφάνεια μεταβαίνουμε στην παρακάτω κατάσταση (βλέπε **Σχήμα 2**).



Σχήμα 3: Παρατηρούμε ότι τα αέρια A και B μετά από κάποιο χρονικό διάστημα αναμιγνύονται πλήρως και δεν μπορούν να διαχωριστούν πλέον από μόνα τους. Η κλίση συγκεντρώσεων των αερίων έχει ισορροπήσει σε κάθε σημείο του δοχείου.

2.1.2.2 Πρώτος Νόμος του Fick για την διάχυση αερίου εντός στερεού.

Όπως παρατηρείται τα αέρια αυτά προσπαθούν να καταλάβουν τα χωρία εκείνα που η συγκέντρωσή τους είναι λιγότερη. Αυτό οδηγεί σε πλήρη ανάμιξη και μηδενική κλίση συγκέντρωσης μετά από ένα μεγάλο χρονικό διάστημα. Για παράδειγμα θεωρείται μια πλάκα ξύλου πάχους Y και επιφάνειας A , (βλέπε Σχήμα 4), όπου και οι δύο πλευρές τις είναι εκτεθειμένες στον ατμοσφαιρικό αέρα. Αν σε χρόνο $t = 0$ εκτεθεί η μία πλευρά σε αέριο ήλιο τότε καθώς ο χρόνος περνά, το αέριο αυτό θα αρχίσει να διεισδύει στο ξύλο. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω της τυχαίας κίνησης των σωματιδίων του ηλίου. Η σωματιδιακή μεταφορά μίας ουσίας σε σχέση με την άλλη ονομάζεται διάχυση. Στο σύστημα που περιγράφεται, το ήλιο θα ονομαστεί είδος **A** και το ξύλο είδος **B**. Η συγκεντρώσεις των ειδών αυτών θα εκφραστούν με κλάσματα μάζας ω_A και ω_B αντίστοιχα.

Για χρόνο $t < 0$ το κλάσμα μάζας του ηλίου ω_A είναι παντού μηδέν. Σε χρόνο $t = 0$ εκτίθεται για πρώτη φορά η μια επιφάνεια του ξύλου με το ήλιο στην θέση $y = 0$ άρα και η συγκέντρωση του ηλίου είναι $\omega_A = \omega_{A0}$ στην θέση $y = 0$ (κάτω επιφάνεια), ενώ στην θέση $y = Y$ (πάνω επιφάνεια), $\omega_A = 0$. Καθώς περνάει ο χρόνος, **μικρό t** , η συγκέντρωση του ηλίου εντός του ξύλου αρχίζει και ισορροπεί έως ότου φτάσει σε σταθερή κατάσταση, όπου η κλίση συγκέντρωσης του ηλίου εντός του ξύλου είναι γραμμική, **μεγάλο t** . Η ροή μάζας του είδους A στην διεύθυνση y , Ω_{Ay} μπορεί να υπολογιστεί με μεγάλη ακρίβεια από την παρακάτω σχέση.

$$\frac{\Omega_{Ay}}{A} = \rho D_{AB} \frac{\omega_{A0} - 0}{Y} \quad (2.2)$$

Οπού ρ η πυκνότητα του συστήματος ξύλου-ηλίου και η σταθερά αναλογίας D_{AB} είναι ο συντελεστής διάχυσης του συστήματος αυτού. Αν επαναληφθεί η παραπάνω εξίσωση για κάποιο διακριτό στοιχείο του συστήματος λαμβάνεται η παρακάτω εξίσωση [Bird et al., 2002]:

$$j_{Ay} = -\rho D_{AB} \frac{d\omega_A}{dy} \quad \text{—————}(2.3)$$

Οπού j_{Ay} είναι ο γραμμομοριακός ρυθμός ροής μάζας του ηλίου στην κατεύθυνση y . Η εξίσωση αυτή είναι η μονοδιάστατη αναπαράσταση του **πρώτου νόμου διάχυσης του Fick**.

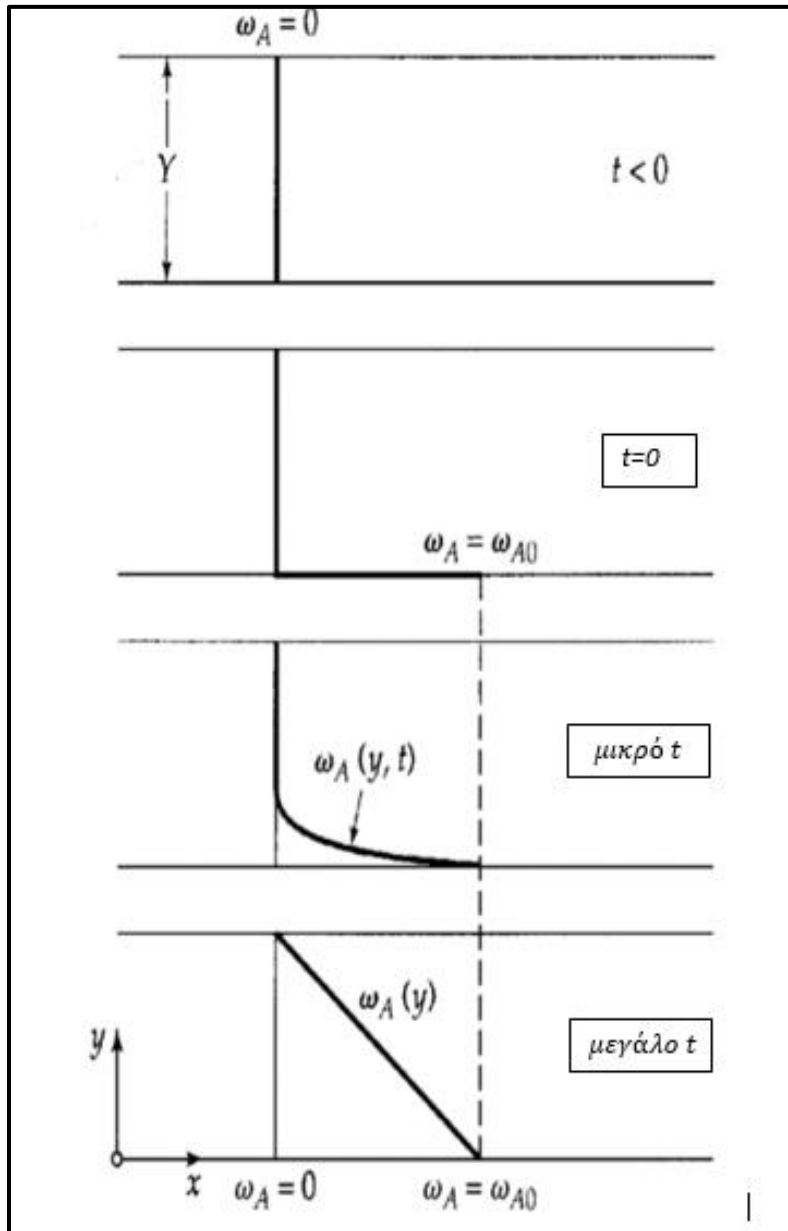
Για όλες τις διαστάσεις,

$$j_A = -\rho D_{AB} \nabla \omega_A \quad (2.4)$$

Ομοίως για το είδος B.

$$j_B = -\rho D_{BA} \nabla \omega_B \quad (2.5)$$

Γραφική αναπαράσταση του φαινομένου της διάχυσης για την παραπάνω περίπτωση:



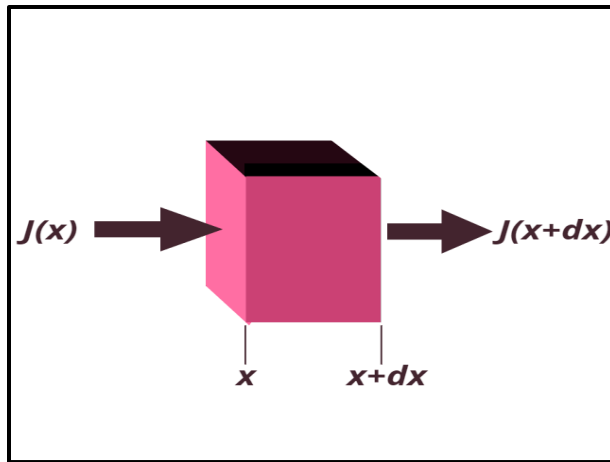
Σχήμα 4: Στα παραπάνω υπό-διαγράμματα παρατηρούμε την εξέλιξη της κλίσης της συγκέντρωσης συναρτήσει του χρόνου για την διάχυση του ηλίου εντος του ζύλου [Bird et al., 2002].

2.1.3 Δεύτερος Νόμος του Fick

Ο πρώτος νόμος του Fick είναι για σταθερή κατάσταση, συχνά όμως οι συγκεντρώσεις αυξάνονται ή μειώνονται. Το ήλιο, από το παραπάνω παράδειγμα, μπορεί να μην ήταν από συνεχή πηγή ώστε η συγκέντρωση να παραμένει πάντοτε αμετάβλητη στο $y = 0$. Ο δεύτερος νόμος του Fick περιλαμβάνει και τον χρόνο στον υπολογισμό των συγκεντρώσεων. Ξεκινώντας με την εξίσωση 2.1.2.4 που περιγράφει την διάχυση, μπορούμε να παραλείψουμε την πυκνότητα και να εκφράσουμε την συγκέντρωση σε μονάδες μάζας ως προς όγκο πάρα κλάσματα μάζας. Αναγράφεται ως εξής:

$$\mathbf{j} = -D\nabla c \left[\frac{M}{L^2 t} \right] \quad (2.6)$$

Από το παρακάτω **Σχήμα 5** αναδιοργανώνονται οι παράμετροι ως εξής.



Σχήμα 5: Εδώ αναπαρίσταται ένα ισοζύγιο μάζας για έναν μοναδιαίο όγκο. Η παροχή μάζας στην είσοδο του όγκου αυτού είναι διαφορετική από αυτή της εξόδου. Έτσι μπορεί να εξαχθεί και ο δεύτερος νόμος του Fick.

Εάν θέσουμε την μεταβολή της συγκέντρωσης με το χρόνο ίση με αυτή της μεταβολής παροχής μάζας ανά απόσταση dx . Λαμβάνουμε την παρακάτω σχέση:

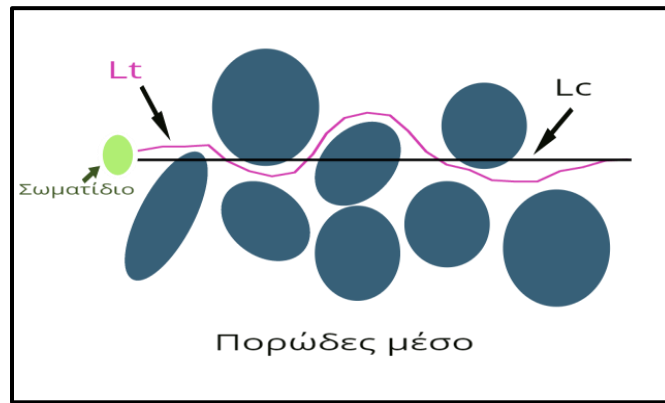
$$\frac{dc(x)}{dt} = \frac{[J(x) - J(dx)]}{dx} \rightarrow \frac{dc(x,t)}{dt} = -\frac{dj}{dx} \overset{J=-D\frac{dc}{dx}}{\rightarrow}$$

Επιλύοντας το ισοζύγιο μάζας καταλήγουμε **στο δεύτερο νόμο του Fick** ο οποίος ορίζεται ως:

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x)}{\partial x^2} \quad (2.7)$$

2.1.4 Αποτελεσματική διάχυση (effective diffusion)

Η αποτελεσματική διάχυση, effective diffusion, D_e χρησιμοποιείται για να περιγράψει ποιο έγκυρα την διάχυση στα πορώδη μέσα. Σε αντίθεση με την διάχυση μιας ουσίας σε ένα ιδεατό και ομοιόμορφο ρευστό μέσο το οποίο μπορεί να είναι επιφανειακά ύδατα ή κάποιο υδατικό διάλυμα, η ετερογένεια των πόρων εξαναγκάζει τα σωματίδια της διαχεόμενης ουσίας να ακολουθούν συγκεκριμένες πορείες, συχνά μεγαλύτερες, μειώνοντας έτσι τον αριθμό των ελεύθερων διαδρομών. Η παραπάνω εξήγηση οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η αποτελεσματική διάχυση πρέπει να είναι μικρότερη από αυτή της μοριακής (βλέπε Σχήμα 6).



Σχήμα 6: Αναπαράσταση διαδρομής σωματιδίου σε ένα πορώδες μέσο. Το L_t το οποίο είναι το πραγματικό μήκος της διαδρομής του σωματιδίου είναι μεγαλύτερο από εκείνο της χαρακτηριστικής διαδρομής, L_c . Αυτός είναι ο κύριος λόγος της διαφοροποίησης της αποτελεσματικής διάχυσης με αυτήν της μοριακής ως $D_e < D$.

Η αποτελεσματική διάχυση ορίζεται ως:

$$D_e = \frac{D}{\tau} \quad (2.8)$$

Όπου D είναι η μοριακή διάχυση και τ , το δαιδαλώδες των πόρων (tortuosity). Το δαιδαλώδες των πόρων ορίζεται βάση του **Σχήματος 6**:

$$\tau = \left(\frac{L_t}{L_c}\right)^2 \quad (2.9)$$

Όπου L_t το πραγματικό μήκος διαδρομής του σωματιδίου εντός του πορώδους και L_c το χαρακτηριστικό μήκος. Από την εξίσωση (2.9) συμπεραίνουμε ότι $\tau \geq 1$ και λόγω αυτού και της εξίσωσης (2.8) $D_e \leq D$.

2.1.5 Εξίσωση συντελεστή μοριακής διάχυσης σε υγρά

Μια από τις επικρατέστερες θεωρητικές σχέσεις υπολογισμού της διάχυσης αραιών διαλυμάτων σφαιρικών σωματιδίων Α σε ρευστό Β είναι η εξίσωση Stokes-Einstein.

$$D = \frac{k_B T}{3\pi\mu_B d_p} \quad [\text{Bird et al., 2002}] \quad (2.10)$$

Όπου T είναι η απόλυτη θερμοκρασία, k_B η σταθερά Boltzmann, μ_B το δυναμικό ιξώδες του ρευστού Β και d_p η ακτίνα του σωματιδίου.

Η εξίσωση Stokes-Einstein εξάγεται χρησιμοποιώντας τη σχέση του Stokes που δίνει την οπισθέλκουσα δύναμη για ένα μικρό σφαιρικό σωματίδιο (Bird et al., 2002)

$$F_D = 3\pi\mu_w d_p v \quad (2.11)$$

Όπου v είναι η ταχύτητα με την οποία το σωματίδιο κινείται, εξαιτίας της διάχυσης, μια μέση απόσταση \bar{x} σε χρονική περίοδο t .

$$v = \frac{\bar{x}}{t} \quad (2.12)$$

Το έργο που παράγεται με τη διάχυση του σωματιδίου ισούται με την οπισθέλκουσα δύναμη επί την απόσταση που διανύει, ή αντίστοιχα $F_D \bar{x}$. Επίσης, η διαθέσιμη θερμική ενέργεια για την κίνηση αυτή του σωματιδίου είναι $k_B T$. Επομένως, μπορούμε να γράψουμε:

$$k_B T = F_D \bar{x} \xrightarrow{F_D = 3\pi\mu_w d_p v} k_B T = (3\pi\mu_w d_p v) \bar{x} \quad (2.13)$$

Συνδυάζοντας την εξίσωση (2.12) και (2.13) προκύπτει η τελική εξίσωση Stokes-Einstein:

$$D_{AB} = \frac{\bar{x}^2}{t} = \frac{k_B T}{3\pi\mu_B d_p} \quad (2.14)$$

2.2 Μεταγωγή (Advection)

Η μεταγωγή είναι η διεργασία εκείνη που περιγράφει την μεταφορά ουσιών σε πορώδη μέσα μέσω μόνον της κίνησης του ρευστού εντός της στερεάς μήτρας. Υπό πλήρης συνθήκες μεταγωγής η ουσία υπό μελέτη κινείται με την μέση ταχύτητα του ρευστού.



Σχήμα 7: Εδώ παρατηρούμε το φαινόμενο της μεταγωγής. Ο ρύπος κινείται εμβολικά εντός του μέσου και δεν μεταβάλλεται το σχήμα του πλουμίου με το χρόνο

Η εξίσωση της μεταγωγής για την μονοδιάστατη περίπτωση γράφεται ως:

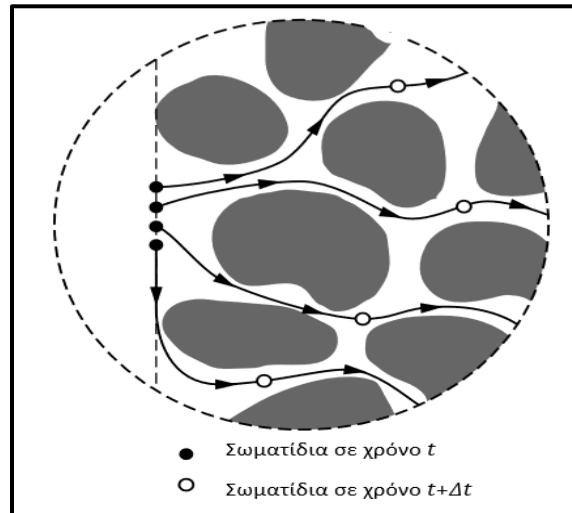
$$\frac{\partial c}{\partial t} + U \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (2.15)$$

Όπου

- C η συγκέντρωση της διαλυμένης ουσίας $\left[\frac{M}{L^3}\right]$,
- t ο χρόνος $[T]$
- και X η χωρική μεταβλητή $[L]$.

2.3 Μηχανική Διασπορά (Mechanical Dispersion)

Η μηχανική διασπορά, D_m , είναι ίσως η πιο πολύπλοκη και αμφιλεγόμενη παράμετρος στην διαδικασία προσδιορισμού της τύχης των ουσιών σε ένα πορώδες μέσο. Λόγο της διαφοροποίησης του σχήματος και μεγέθους των κόκκων και των πόρων ενός πορώδους μέσου οι τοπικές ενδοπορώδεις ταχύτητες τείνουν να αποκλίνουν από την μέση ταχύτητα ροής του ρευστού. Οι διαφοροποιήσεις αυτές του πεδίου ροής ταχυτήτων οδηγούν τα σωματίδια/ουσίες να μεταφέρονται με διαφορετικούς ρυθμούς οδηγώντας έτσι σε μία διεργασία μακροσκοπικής μίξης όμοια με αυτή αν υπήρχε μόνο παθητική μεταφορά. Από την **Σχήμα 8** βλέπουμε την διαφοροποίηση των τροχιών των σωματιδίων μετά την έλευση χρόνου Δt .



Σχήμα 8: Εδώ παρατηρείται το φαινόμενο της μηχανικής διασποράς. Βλέπουμε ότι τα σωματίδια ακολουθούν διαφορετικές τροχιές και καταλήγουν σε χρόνο $t + \Delta t$ να μην είναι ευθυγραμμισμένα ως προς την κύρια ροή. [Batu, 2005]

Ο συντελεστής μηχανικής διασποράς, D_m , ορίζεται ως:

$$[D_m] = [A][U] \quad (2.16)$$

Όπου $[A]$ $[L]$ είναι ο τανυστής **τάσης** διασποράς και $[U]$ $\left[\frac{L}{T}\right]$ η μέση ενδοπορώδης ταχύτητα ροής. Για ένα ανισότροπο πορώδες μέσο στις 3 διαστάσεις, όπου η κύρια κατεύθυνση της μέσης ενδοπορώδους ταχύτητας συμπίπτει με τον άξονα συντεταγμένων του συστήματος, η εξίσωση αυτή παίρνει τη μορφή (Bear, 1979):

$$[D_m] = [A][U] = \begin{bmatrix} a_{xx}U & 0 & 0 \\ 0 & a_{yy}U & 0 \\ 0 & 0 & a_{zz}U \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

2.4 Υδροδυναμική Διασπορά (Hydrodynamic Dispersion)

Η υδροδυναμική διασπορά εκφράζεται από το άθροισμα δυο ορών: αυτόν της μηχανικής διασποράς και αυτόν της αποτελεσματικής διάχυσης.

$$D_h = D_e + D_m \quad (2.18)$$

Όπου D_e ο συντελεστής αποτελεσματικής διάχυσης και D_m αυτός της μηχανικής διάχυσης

Επίσης η εξίσωση 2.4.1 μέσω της 2.3.2 γράφεται και ως:

$$D_h = D_e + aU \quad (2.19)$$

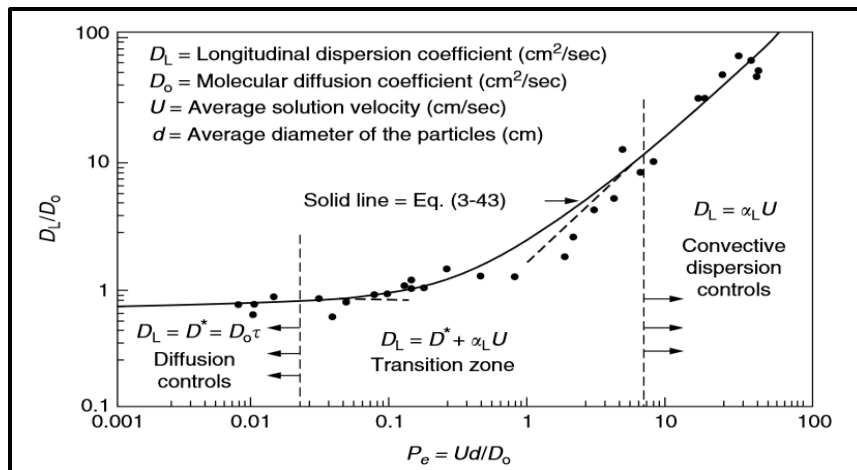
Στην παρούσα μελέτη εξετάσαμε μόνο την διαμήκης υδροδυναμική διασπορά ως προς την κύρια κατεύθυνση ροής:

$$D_L = D_e + a_L U \rightarrow D_{h_{xx}} = D_e + a_{xx} U \quad (2.20)$$

Σε συνθήκες στις οποίες η ταχύτητα ροής είναι μηδενική η υδροδυναμική διασπορά ισούται με το συντελεστή αποτελεσματικής διάχυσης. Η επίδραση της ταχύτητας ως προς την διαμήκης υδροδυναμική διασπορά, $D_{h_{xx}} = D_L$, μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας τον αριθμό Peclet που παίρνει υπόψιν την επίδραση της συμμεταφοράς ως προς τη διάχυση. Ο Αριθμός Peclet είναι ένας αδιάστατος αριθμός που ορίζεται ως:

$$Pe = \frac{U d_c}{D} \quad (2.21)$$

Όπου $U \left[\frac{L}{t} \right]$ είναι η μέση ταχύτητα του ρευστού, $d_c [L]$ είναι το χαρακτηριστικό μήκος που συχνά θεωρείται και η μέση διάμετρος κόκκου [Batu, 2005, p62] και $D \left[\frac{L^2}{t} \right]$ η μοριακή διάχυση. Παρατηρείται από το παρακάτω **Σχήμα 9** ότι καθώς αυξάνεται ο αριθμός Peclet τόσο αυξάνεται η επίδραση της μεταγωγής-διασποράς, ο λόγος $\frac{D_L}{D_0}$ ή $\frac{D_L}{D} \gg 1$ ενώ το αντίθετο συμβαίνει καθώς μειώνεται και αναλαμβάνει δράση η αποτελεσματική διάχυση.



Σχήμα 9: Αδιάστατος διαμήκης συντελεστής υδροδυναμικής διασποράς D_L/D συναρτήσει του αδιάστατου αριθμού Peclet [Batu, 2005, p62]

3. Στατιστική

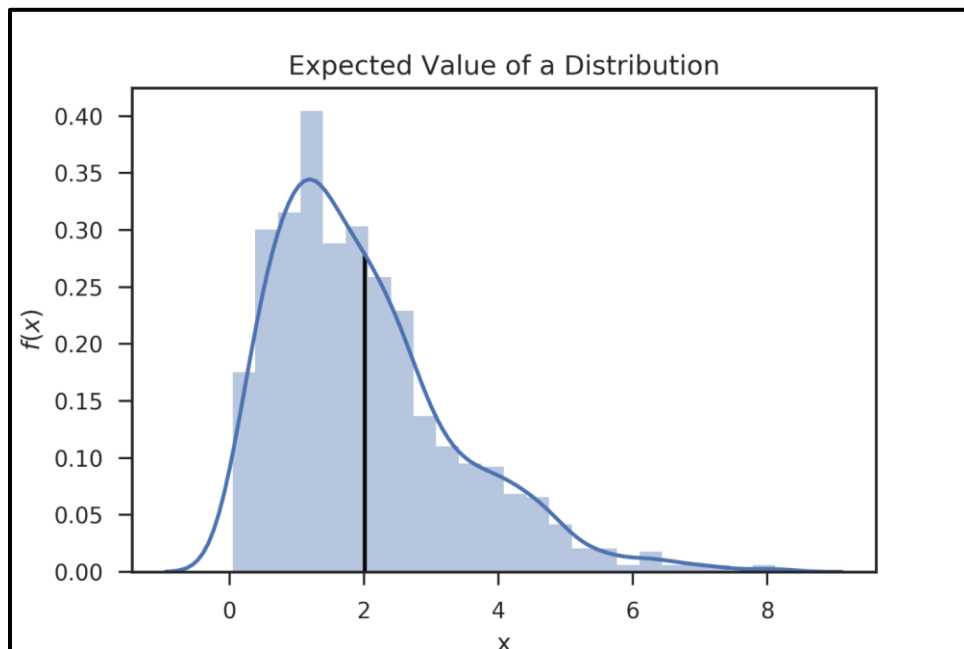
3.1 Αναμενόμενη Τιμή

Για να απαντηθεί το ερώτημα που αφορά την θέση του κέντρου μάζας του ρύπου θα χρησιμοποιηθεί η έννοια της αναμενόμενης τιμής [Richard W. Hamming, 1991].

Για συνεχείς μεταβλητές ορίζεται ως:

$$E[X] = \int_{-\infty}^{\infty} xf(x) dx \quad (3.1)$$

Οπού x είναι η τυχαία μεταβλητή και $f(x)$ η κατανομή πιθανότητας της (κατανομή του ρύπου συναρτήσει της θέσης του). Στο παρακάτω διάγραμμα απεικονίζεται με την κάθετη μαύρη γραμμή εντός της πιθανοτικής κατανομής.



Σχήμα 10: Κατανομή μίας τυχαίας μεταβλητής x .

Στην περίπτωση που η μεταβλητή είναι διακριτή [Hamming, 1991], η αναμενόμενη τιμή ορίζεται ως:

$$E[X] = \sum p_i x_i \quad (3.2)$$

όπου p_i είναι η πιθανότητα και x_i η αναμενόμενη κατάσταση.

3.2 Διακύμανση Τυχαίας Μεταβλητής

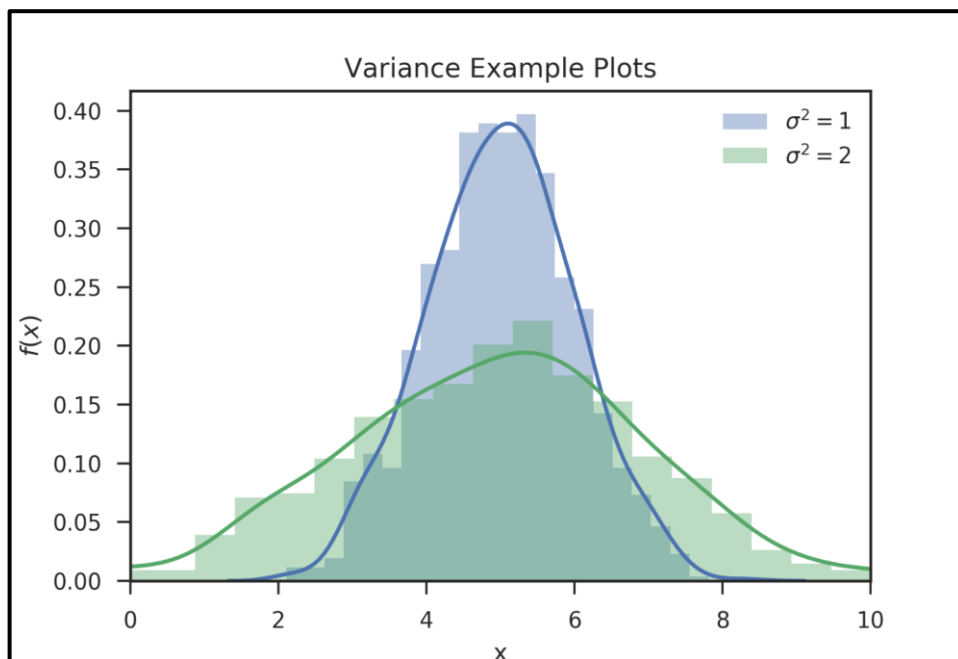
Για να απαντηθεί το ερώτημα που αφορά τη διασπορά του ρύπου στο χώρο πρέπει πρώτα να γίνει αναφορά για την διακύμανση μιας τυχαίας μεταβλητής και μετά να εκφραστεί με τη χρήση στατιστικών ροπών.

Η διακύμανση μιας τυχαίας μεταβλητής X είναι η αναμενόμενη τιμή της τετραγωνικής απόκλισης από τη μέση τιμή του X . Μετρά πόσο μακριά ένα σύνολο τυχαίων αριθμών εξαπλώνεται από την μέση τιμή του.

Εκφράζεται ως:

$$\sigma^2 = \int (x - \mu)^2 f(x) dx \rightarrow \sigma^2 = \int x^2 f(x) dx - \mu^2 \quad (3.3)$$

Στο παρακάτω διάγραμμα αποτυπώνονται δυο καμπύλες με διαφορετικές διασπορές αλλά έχουν την ίδια αναμενόμενη τιμή. Τέτοιες διαφοροποιήσεις παρουσιάζονται όταν απέχουν κατά πολύ χρονικά οι δειγματοληψίες. Το πλούμιο απλώνεται με το χρόνο άρα μεγαλώνει και η διακύμανση ως προς κάθε κατεύθυνση.

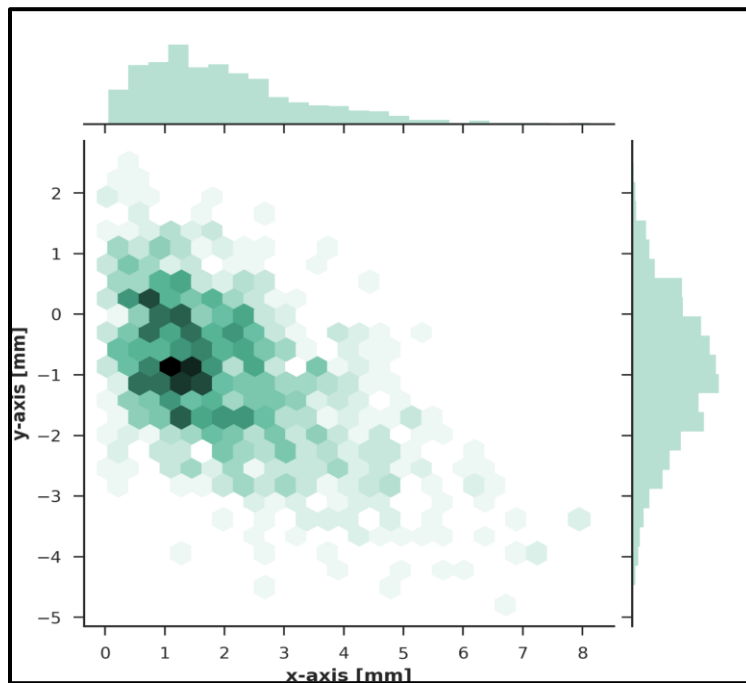


Σχήμα 11: Δύο κατανομές με διαφορετικές διακυμάνσεις.

4. Ανάλυση Ροπών

4.1 Χωρικές Ροπές

Κατά την μεταφορά ρύπων στο υπέδαφος είτε σε μορφή ουσιών ή διακριτών σωματιδίων, κολλοειδών, δημιουργείται πλούμιο. Το πλούμιο αυτό ανάλογα με τις φυσικοχημικές ιδιότητες του ρύπου, το μέσο μέσα στο οποίο μεταφέρονται, καθώς και τα υδροδυναμικά πεδία τα οποία επιδρούν σε αυτό μπορούν να αναπαρασταθούν εύκολα με την χρήση πιθανοτικών κατανομών. Καθώς ο ρύπος μεταφέρεται στο μέσο μπορεί να αποτυπώνεται ανά κάθε χρονική στιγμή που έχει οριστεί, Δt , την στιγμιαία χωρική κατανομή του στο υπέδαφος ως προς κάθε κατεύθυνση ενδιαφέροντος. Το παρακάτω σχήμα, **Σχήμα 12**, παρουσιάζει ακριβώς αυτό, αποτυπώνει μια στιγμιαία κατανομή ενός ρύπου ως προς την κατεύθυνση x και y .



Σχήμα 12: Εδώ παρατηρείται η κατανομή των σωματιδίων σε ένα διδιάστατο μέσο κατά την διεύθυνση x,y σε κάποιο χρόνο t .

Έχοντας πλέον αυτό το στατιστικό εργαλείο μπορούν να τεθούν οι εξής ερωτήσεις, όπως: Που είναι το κέντρο μάζας του ρύπου, ποια είναι οι διασπορά του ρύπου, πόσο γρήγορα κινείται το πλούμιο, πόση είναι η ποσότητα του ρύπου που μελετάται. Τα ερωτήματα αυτά μπορούν να απαντηθούν πολύ εύκολα χρησιμοποιώντας στατιστικές μεθόδους.

4.1.1 Χωρική ροπή n τάξης

Τώρα μπορούμε να εισάγουμε την ιδέα της στατιστικής ροπής η οποία δεν είναι τίποτα άλλο παρά ένα εργαλείο για να περιγράψει το σχήμα σημείων στο χώρο. Από της ροπές αυτές μπορούν να προκύψουν σχέσεις όπως αυτή της αναμενόμενης τιμής και τις διακύμανσης.

Μαθηματικά για ένα δισδιάστατο μέσω ορίζεται ως [Batu, 2005]:

$$\mu_{ij}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_e C(x, y, t) x^i y^j dx dy \quad (4.1)$$

Όπου φ_e είναι το ενεργό πορώδες του μέσου, x, y η χωρικές συντεταγμένες και $C(x, y, t)$ η συγκέντρωση της ουσίας στο χώρο και στο χρόνο. Πρέπει να αναφερθεί ότι στην παρούσα μελέτη το ενεργό πορώδες ήταν $\varphi_e = 1$ οι διαστάσεις του μέσου διακριτές και αντί συγκεντρώσεων χρησιμοποιήθηκαν αριθμοί σωματιδίων σε κάθε συντεταγμένη στο χώρο έτσι η εξίσωση (4.1) γράφεται ως:

$$\mu_{ij}(t) = \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} N(x, y, t) x^i y^j dx dy \quad (4.2) \quad [James et. al. 2011]$$

Οι ροπές αυτές κανονικοποιούνται με την χρήση της μηδενικής ροπής και η γενικευμένη εξίσωση (4.2) γράφεται ως:

$$m_{ij}(t) = \frac{\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} N(x, y, t) x^i y^j dx dy}{\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} N(x, y, t) dx dy} \quad (4.3) \quad [James et. al. 2011]$$

4.1.2 Χωρική ροπή 0^{ης} τάξης

Η χωρική ροπή 0^{ης} τάξης ποσοτικοποιεί τη συνολική μάζα των σωματιδίων στο πορώδες μέσο σε κάποιο χρόνο t . Θέτοντας το $i = j = 0$ η εξίσωση (4.1) παίρνει την μορφή:

$$\begin{aligned} \mu_{00}(t) &= \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} N(x, y, t) x^0 y^0 dx dy \rightarrow \\ &\rightarrow \mu_{00}(t) = \int_0^{L_y} \int_0^{L_x} N(x, y, t) dx dy \quad (4.4) \end{aligned}$$

Όπου $N(x, y, t)$ οι αριθμοί των σωματιδίων σε μια συντεταγμένη στο χρόνο και στον χρόνο, L_x το μήκος του πορώδους μέσου (κύρια διεύθυνση ροής) και L_y το πλάτος του πορώδους.

4.1.3 Χωρική ροπή 1ης τάξης

Η κανονικοποιημένη χωρική ροπή 1ης τάξης περιγράφει το κέντρο μάζας του πλουμίου στο πορώδες μέσο σε κάποιο χρόνο t . Θέτοντας το $n = 1$ επανερχόμαστε στην τιμή:

$$m_{10}(t) = \frac{\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} N(x, y, t) x^1 dx dy}{\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} N(x, y, t) dx dy} \quad (4.4)$$

4.1.3.1 Ταχύτητα του πλουμίου

Το πόσο γρήγορα κινείται ο ρύπος στο υπέδαφος μπορεί να εξαχθεί χρησιμοποιώντας την πρώτη κανονικοποιημένη χωρική ροπή. Δηλαδή, εάν δημιουργηθεί ένα διάγραμμα με τον χρόνο στον οριζόντιο άξονα και την πρώτη ροπή στον κάθετο θα δούμε μια σχέση η οποία αυξάνεται με το χρόνο, μια ευθεία. Η κλίση αυτής της ευθείας είναι και η ταχύτητα του πλουμίου με μονάδες $[L/t]$ όπως θα δούμε και παρακάτω **Σχήμα 23**.

4.1.4 Χωρική ροπή 2ης τάξης

Η κανονικοποιημένη ροπή 2ης τάξης περιγράφει την χωρική διακύμανση της κατανομής των σωματιδίων στο πορώδες μέσο. Για την περίπτωση της κύριας ροής, κατά x , γράφεται ως εξής:

$$m_{20}(t) = \frac{\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} N(x, y, t) x^2 dx dy}{\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} N(x, y, t) dx dy} \quad (4.5)$$

4.1.5 Διακύμανση του ρύπου

Η διακύμανση του ρύπου του ρύπου που θα φανεί χρήσιμη στο κεφάλαιο 4.3 υπολογίζεται ως εξής:

$$\sigma_{xx}^2 = \frac{\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} N(x, y, t) x^2 dx dy}{\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} N(x, y, t) dx dy} - x_c^2 \rightarrow \sigma_{xx}^2 = \frac{\mu_{20}}{\mu_{00}} - x_c^2 \rightarrow$$
$$\sigma_{xx}^2 = \frac{\mu_{20}}{\mu_{00}} - m_{10}^2 \rightarrow \sigma_{xx}^2 = m_{20} - m_{10}^2 \quad (4.6) \quad [Batu, 2005]$$

Όπου μ_{20} η δεύτερη μη κανονικοποιημένη ροπή 2ης τάξης, μ_{00} η μηδενικής τάξης ροπή που υποδεικνύει την συνολική μάζα στο μέσο και x_c το κέντρο μάζας του πλουμίου ή αλλιώς m_{10} από την εξίσωση (4.4)

4.2 Χρονικές Ροπές

Ομοίως με τις χωρικές ροπές υπάρχουν και οι χρονικές. Οι οποίες δεν εξαρτώνται από το χρόνο αλλά από τη θέση στην οποία γίνεται η μέτρηση. Η εφαρμογή τους γίνεται συνήθως χρησιμοποιώντας τις καμπύλες εξόδου του ρύπου από το μέσο ή σε κάποιο συγκεκριμένο σημείο δειγματοληψίας. Η εφαρμογή της μεθόδου γίνεται σε μια καμπύλη απόκρισης.

Μαθηματικά [James et. al., 2011] ορίζεται ως εξής:

$$m_t(x) = \int_0^{\infty} t^n N(X, t) dt \quad (4.7)$$

Όπου t ο χρόνος, n η τάξη της ροπής και $N(x, t)$ ο αριθμός των σωματιδίων στην θέση x για όλους του χρόνους t . Η χρονική ροπή 0ης τάξης εκφράζει την συνολική μάζα του ρύπου εντός της καμπύλης εξόδου. Η κανονικοποιημένη χρονική ροπή 1ης τάξης εκφράζει το μέσο χρόνο παραμονής του ρύπου στο μέσο. Και η 2η κανονικοποιημένη χρονική ροπή εκφράζει την διακύμανση του χρόνου παραμονής. Για να υπολογιστεί η ροπή αυτή χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος ολοκλήρωσης του τραπεζιού καταλήγοντας στην κανονικοποιημένη μορφή:

$$\bar{m}_t(x) = \frac{\sum_{i=2}^{\omega} \frac{1}{2} (t_i^n N_i + t_{i-1}^n N_{i-1}) (t_i - t_{i-1})}{\sum_{i=2}^{\omega} \frac{1}{2} (N_i + N_{i-1}) (t_i - t_{i-1})} \quad (4.8) \quad [James et. al. 2011]$$

4.3 Υπολογισμός υδροδυναμικής διασποράς σωματιδίων

Από τον Crank (1956) και Bear (1979) λαμβάνεται η σχέση η οποία συνδέει τη διακύμανση με τον συντελεστή διασποράς του ρύπου παίρνοντας τις εξισώσεις (4.6) και $\sigma = (2D_h t)^{1/2}$ μπορεί να υπολογιστεί η υδροδυναμική διασπορά ως προς την κύρια κατεύθυνση ροής ως εξής:

$$\sigma = (2D_h t)^{1/2} \rightarrow \sqrt{\sigma_{xx}^2} = (2D_{h_{xx}} t)^{1/2} \rightarrow m_{20} - m_{10}^2 = 2D_{h_{xx}} t \rightarrow$$
$$D_{h_{xx}} = \frac{(m_{20} - m_{10}^2)}{2} t \quad (4.9) \quad [Batu, 2005]$$

4.4 Υπολογισμός τάσης διασποράς σωματιδίων

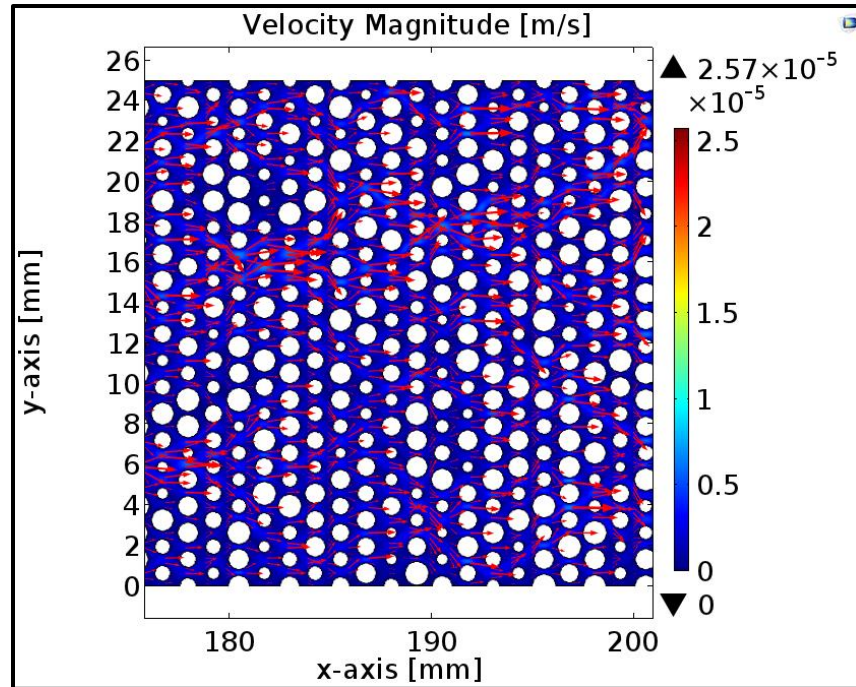
Ο υπολογισμός της τάσης διασποράς των σωματιδίων γίνεται με την χρήση της εξίσωσης (2.19) και αυτής της (4.9) δηλαδή:

$$D_h = D_e + a_{xx}U \rightarrow a_{xx} = \frac{D_h - D_e}{U} \rightarrow a_{xx} = \frac{\left[\frac{(m_{20} - m_{10}^2)}{2} t \right] - D_e}{U} \quad (4.10)$$

5. Μοντελοποίηση Προβλήματος

5.1 Υπολογισμός πεδίου ροής

Για να προσομοιωθεί η κίνηση των σωματιδίων πρέπει να προϋπάρχει ένα πεδίο ροής του ρευστού εντός του πορώδους μέσου. Το πεδίο αυτό θα χρησιμεύσει στον υπολογισμό της οπισθέλκουσας δύναμης που δρα στα σωματίδια βλέπε (Κεφάλαιο 5.2) Στην **Σχήμα 13** παρουσιάζεται ένα τμήμα του πορώδους με το επιθυμητό αποτέλεσμα της μοντελοποίησης αυτής. Εμπεριέχει και κάποιες ενδεικτικές κατευθύνσεις του πεδίου ροής και μέσω του χρωματικού υπομνήματος δεξιά μπορεί ποιοτικά να υπολογιστεί και το μέτρο της ταχύτητας σε κάθε σημείο του πορώδους.



Σχήμα 13: Εδώ παρουσιάζεται ένα τμήμα του δισδιάστατου πορώδους μέσου στο οποίο έχουν επιλυθεί η εξισώσεις ροής του ρευστού. Στο δεξιό μέρος του σχήματος παρουσιάζεται η χρωματική αντιστοίχιση του μέτρου του πεδίου ταχυτήτων.

Για την επίλυση του πεδίου ροής χρησιμοποιήθηκαν η εξισώσεις Navier-Stokes, που παίρνουν το όνομα από τους Claude-Louis Navier και George Gabriel Stokes και χρησιμοποιούνται για την περιγραφή της κίνησης ρευστών. Συχνά θεωρούνται και ο δεύτερος νόμος κίνησης του Newton για τα ρευστά. Οι εξισώσεις αυτές έχουν την μορφή:

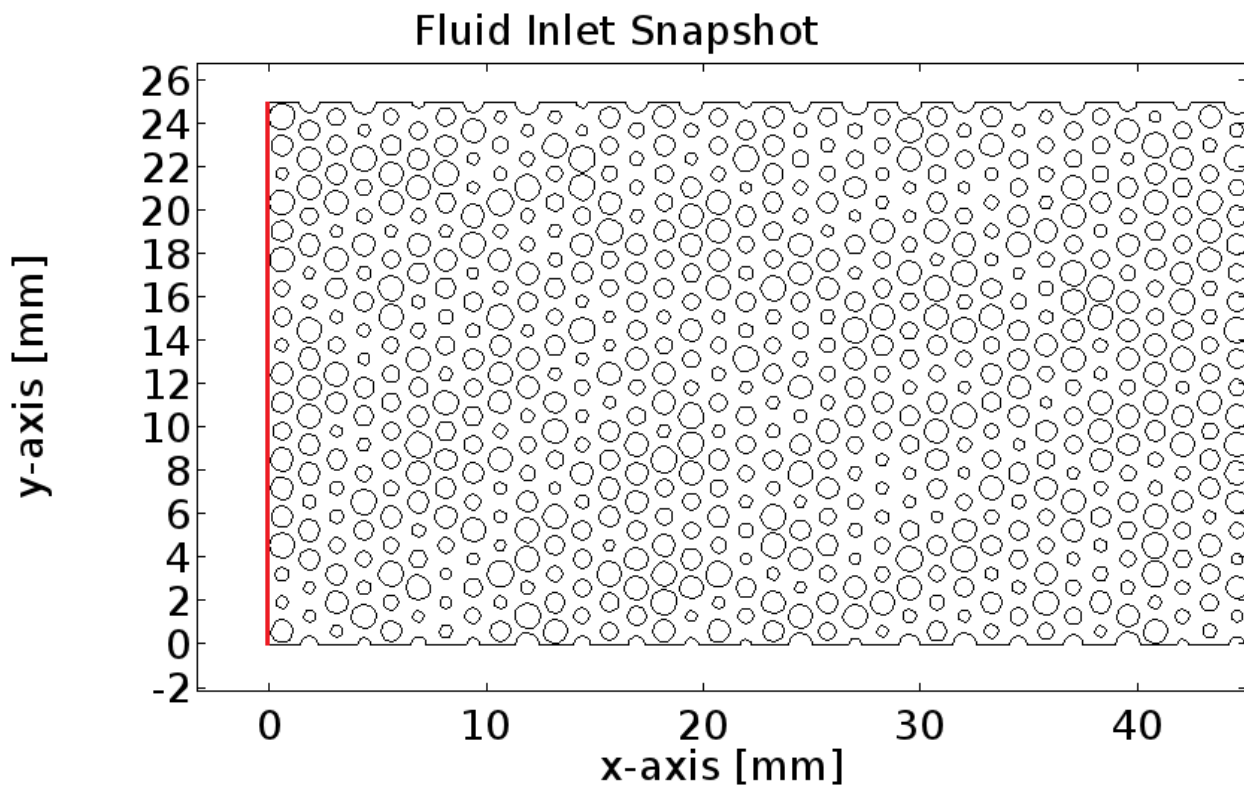
$$\left\{ \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) \right\}^a = \{ -\nabla p \}^b + \left\{ \nabla \cdot (\mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I}) \right\}^c + \{ \mathbf{F} \}^d \left[\frac{\text{N}}{\text{m}^3} \right] \quad (5.1)$$

Όπου \mathbf{u} είναι η ταχύτητα του ρευστού, p είναι η πίεση του ρευστού, ρ είναι η πυκνότητα του ρευστού και μ το δυναμικό ιξώδες. Οι διάφοροι όροι αντιστοιχούν σε αδρανειακές δυνάμεις (\mathbf{a}), σε δυνάμεις πίεσης (\mathbf{b}), σε δυνάμεις ιξώδους (\mathbf{c}) και εξωτερικές δυνάμεις (\mathbf{d}). Η εξίσωση αυτές πάντοτε επιλύονται μαζί με την εξίσωση συνέχειας:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (5.2)$$

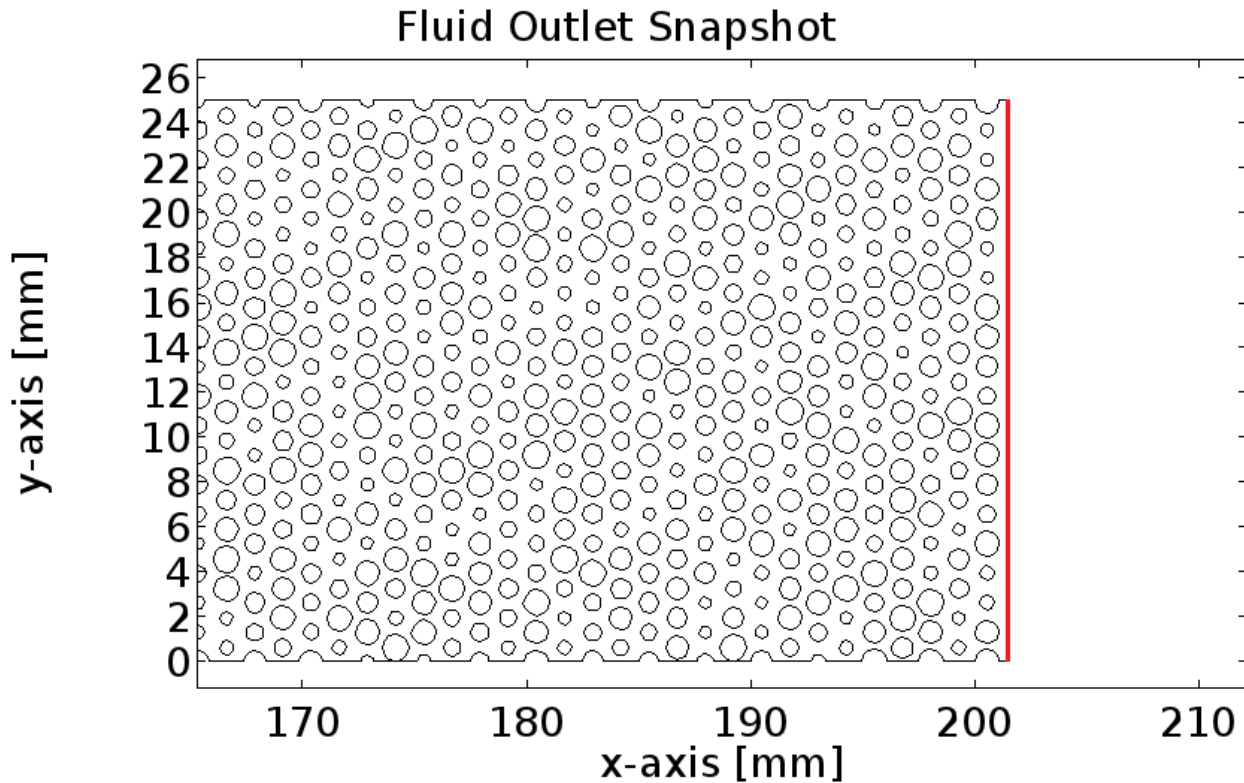
Οι εξισώσεις Navier-Stokes αντιπροσωπεύουν την διατήρηση της ορμής ενώ η εξίσωση συνέχειας την διατήρηση της μάζας. Το πρόγραμμα COMSOL επιλύει τις εξισώσεις αυτές με την χρήση της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων (Finite-Elements).

Στο μοντέλο θεωρήθηκαν συνθήκες στρωτής και ασυμπίεστης ροής. Αρχικά επιλύθηκε το πεδίο ροής του προβλήματος θέτοντας μια μέση ταχύτητα $v = 10^{-6} \left[\frac{m}{s} \right]$ του ρευστού κατά μήκος της εισόδου του εικονικού πορώδους μέσου (βλέπε **Σχήμα 14**).



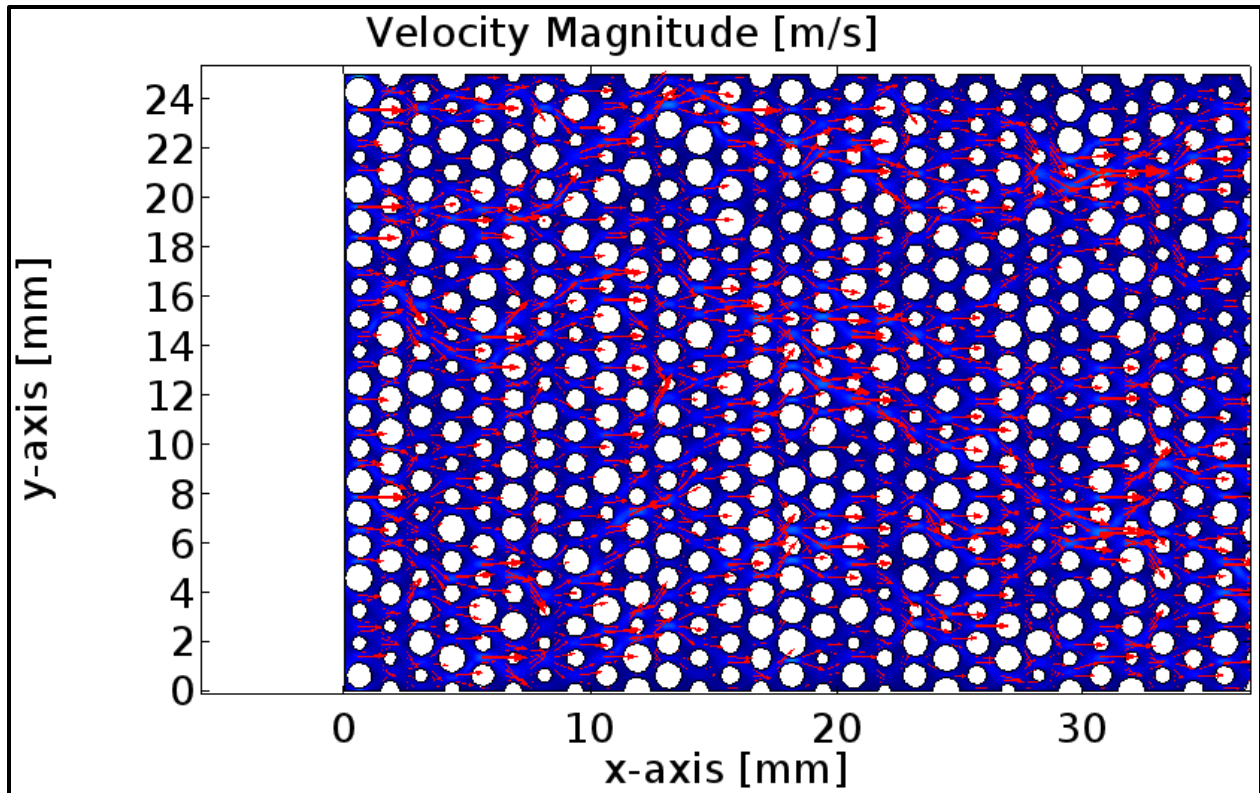
Σχήμα 14: Ορισμός εισόδου του ρευστού στο πορώδες μέσο.

Στη συνέχεια ορίστηκαν οι συνθήκες εξόδου του ρευστού από το πορώδες μέσω θέτοντας σταθερή πίεση εξόδου, $P = 0 Pa$ χωρίς αντίσταση στην εξερχόμενη ροή (βλέπε **Σχήμα 15**).



Σχήμα 15: Ορισμός εξόδου του ρευστού από το πορώδες μέσω.

Η συνθήκες ροής στα τοιχώματα ορίστηκαν χωρίς επιφανειακή ολίσθηση (no slip), δηλαδή μηδενική ταχύτητα στα τοιχώματα και την παραβολική αύξηση της ταχύτητας καθώς απομακρύνεται το ρευστό από αυτά. Τέλος, η πυκνότητα του ρευστού τέθηκε ως $\rho = 1000 \frac{kg}{m^3}$, και το δυναμικό ιξώδες $\mu = 0.01 Pa \cdot s$. Επιλύοντας το πρόβλημα ροής λάβαμε ένα αποτέλεσμα όπως αυτό του **Σχήματος 16**. Η ταχύτητα του ρευστού κυμαίνεται γύρω στα $0.5 \cdot 10^{-5} \left[\frac{m}{s} \right]$ υψηλότερη από αυτή της μέσης ταχύτητας εισόδου $10^{-6} \left[\frac{m}{s} \right]$. Αυτό συμβαίνει λόγω της ενδοπορώδης ταχύτητας δηλαδή τις στένωσης των πόρων οδηγώντας στην μείωση της επιφάνειας και στη συνέχεια την αύξηση της ταχύτητας. Οι ρυθμίσεις για τις παραμέτρους του μοντέλου ροής του ρευστού βρίσκονται στο ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Γ.



Σχήμα 16: Πεδίο ροής εντός του πορώδους μέσου. Παρατηρείται ότι είναι σχετικά ομοιόμορφη χωρίς έντονες γραμμές ροής. Ο άξονας x αναπαριστά την κατεύθυνση της κύριας ροής, διαμήκης κατεύθυνση, και αυτός του y θεωρείται η εγκάρσια διάσταση. Δεξιά παρουσιάζεται ο κώδικας των χρωμάτων του πεδίου.

5.2 Μεταφορά Σωματιδίων

Το πρόγραμμα παρακολούθησης σωματιδίων (Particle Tracing Module) του COMSOL είναι ένα γενικής χρήσης εργαλείο που χρησιμοποιείται για την καταγραφή των τροχιών των σωματιδίων παρουσία ενός εξωτερικού πεδίου. Το σε αυτήν την περίπτωση ήταν ένα πεδίο ταχυτήτων ενός ρευστού κινούμενο διαμέσου ενός πορώδους μέσου.

Η εξίσωση που χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση της κίνησης των σωματιδίων (από την βιβλιοθήκη των ενσωματωμένων εξισώσεων του COMSOL) ήταν η εξής:

$$\frac{d}{dt}(m_p v) = F_D + F_{Brown} \quad (5.3)$$

Οι όροι στην δεξιά πλευρά της εξίσωσης αναπαριστούν τις δυνάμεις που δρουν στα σωματίδια. Στην παρούσα μελέτη θεωρήθηκαν δύο: η δύναμη οπισθέλκουσας F_D και η δύναμη Brown F_{Brown} .

Η οπισθέλκουσα δύναμη ορίστηκε (βιβλιοθήκη COMSOL) ως:

$$F_D = \left(\frac{1}{\tau_p} \right) m_p (u - v) \quad (5.4)$$

όπου:

- m_p [kg] η μάζα του σωματιδίου.
- τ_p [s] ο χρόνος που απαιτείται για να αποκτήσει το σωματίδιο τερματική ταχύτητα.

- Στην περίπτωση σφαιρικών σωματιδίων: $\tau_p = \frac{r_p d_p^2}{18m}$ (5.6)

- u [m/s] η ταχύτητα του ρευστού.
- v [m/s] η ταχύτητα του σωματιδίου.
- r_p [kg/m³] η πυκνότητα του σωματιδίου.
- d_p [m] η διάμετρος του σωματιδίου.
- m [Pa*s] το δυναμικό ιξώδες του ρευστού.

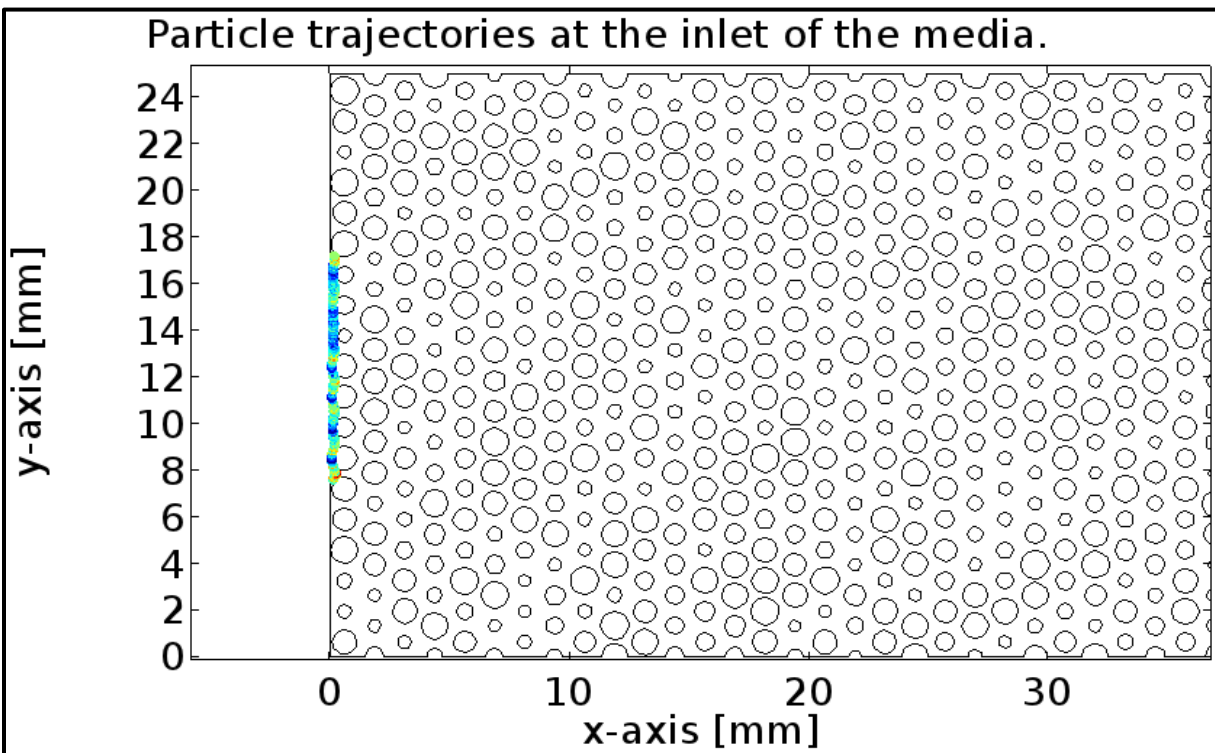
Και η δύναμη Brown (Βιβλιοθήκη COMSOL) ορίστηκε ως:

$$F_{Brown} = Z \sqrt{\frac{12\rho k_B T r_p}{Dt}} \quad (5.7)$$

όπου:

- Δt είναι το χρονικό βήμα του επιλυτή.
- r_p η ακτίνα του σωματιδίου.
- T η απόλυτη θερμοκρασία.
- k_B η σταθερά Boltzmann.
- m το ιξώδες του ρευστού.
- Z μια τυχαία κανονικά κατανομημένη μεταβλητή με μέση τιμή 0 και τυπική απόκλιση 1.

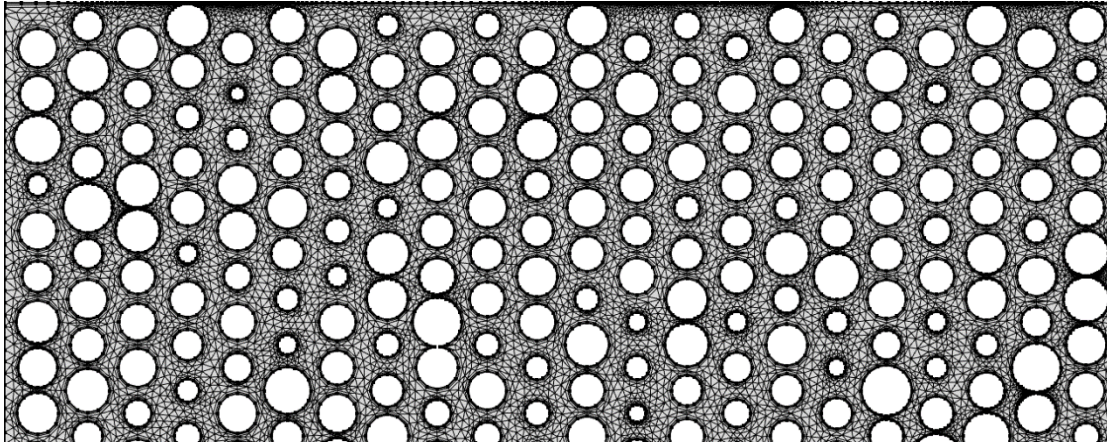
Η επίλυση των τροχιών των σωματιδίων εντός του μέσου πραγματοποιήθηκε μετά από αυτή του πεδίου ροής. Ο λόγος ήταν ότι η οπισθέλκουσα δύναμη των σωματιδίων απαιτούσε υπάρχον πεδίο ταχυτήτων. Επίσης, δεν υπήρχαν αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων-σωματιδίων και σωματιδίων-στερεού όπως προσρόφηση. Τα σωματίδια απελευθερώθηκαν στην είσοδο του κέντρου του μέσου καταναμημένα σε μια ένα ευθύγραμμο τμήμα 10 [mm] (βλέπε Σχήμα 17). Στην έξοδο του πορώδους η συνθήκη των σωματιδίων ήταν να παγώνουν μόλις έρθουν σε επαφή με το σύνορο το τελικό. Οι ρυθμίσεις για τις παραμέτρους του μοντέλου μεταφοράς των σωματιδίων βρίσκονται στο ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Δ.



Σχήμα 17: Κατανομή σωματιδίων μετά από χρόνο 2 min στο ευθύγραμμο τμήμα της εισόδου του πορώδους μέσου. Παρατηρείται ότι η ταχύτητες διαφέρουν από σωματίδιο σε σωματίδιο, χρωματική διαφορά.

5.3 Μέθοδοι επίλυσης

Για να επιλυθούν οι μερικές διαφορικές εξισώσεις που προκύπτουν από τις εξισώσεις στρωτής ροής του νερού καθώς και της κίνησης των σωματιδίων για κάθε χρονικό βήμα, το πρόγραμμα προσομοίωσης COMSOL χρησιμοποίησε την μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων. Δημιουργήθηκε ελεύθερο πλέγμα (βλέπε **Σχήμα 18**) του οποίου η ανάλυση των στοιχείων ήταν σε εύρος μεγέθους από $[0.175 - 5.5]$ mm και με 2 στρώματα στα τοιχώματα/σύνορα.

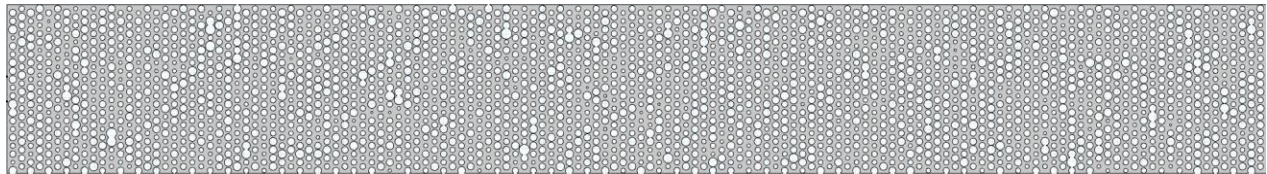


Σχήμα 18: Διακριτοποίηση του πορώδους μέσου χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα προσομοίωσης.

Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων διακριτοποιεί τις μερικές διαφορικές εξισώσεις ώστε να επιλυθούν αριθμητικά. Οι δύο αριθμητικοί επιλυτές που χρησιμοποιήθηκαν ήταν ο PARDISO solver και ο GMRES solver. Ο επιλυτής PARDISO είναι ένα πακέτο κώδικα που χρησιμοποιείται επί τω πλείστον για την επίλυση μεγάλων αραιών συμμετρικών και μη γραμμικών συστημάτων. Ενώ ο GMRES είναι ένας αναδρομικός επιλυτής μη συμμετρικών γραμμικών συστημάτων. Ο PARDISO χρησιμοποιήθηκε για την επίλυση της ροής του ρευστού και ο GMRES για την επίλυση της κίνησης των σωματιδίων στο πορώδες.

5.4. Κατασκευή εικονικού πορώδους μέσου

Το πορώδες μέσο κατασκευάστηκε χρησιμοποιώντας προσωπικό κώδικα compy (<https://github.com/gramfilis/compy>). Στο δισδιάστατο πακέτο του κώδικα η παραγωγή των πόρων επιλέχθηκε ως τυχαία. Η διαδικασία ήταν η εξής: Οι διαστάσεις του εξωτερικού ορθογωνίου εισήχθησαν στην σχετική συνάρτηση και το σχήμα αυτό αποθηκεύτηκε ως αρχείο .dxf και ως στρώμα (AutocCAD layer) όπως αυτά του προγράμματος AutoCAD. Στην συνέχεια, δημιουργήθηκε ένας κάναβος, με συμμετρικά και ίσα διεσπαρμένα στον χώρο, σημεία. Μετά, κάθε ένα από τα σημεία ήταν το κέντρο ενός κύκλου με ακτίνα υπολογισμένη από ομοιόμορφη κατανομή $[0.1, 0.5][mm]$. Οι κύκλοι και οι συντεταγμένες αποθηκεύτηκαν ως ένα ξεχωριστό στρώμα από αυτό του ορθογωνίου. Τα δύο στρώματα αφαιρούνται το ένα από το άλλο για να δημιουργήσουν τα διάκενα/τους πόρους όπου θα ρέει το ρευστό. Το μέσο που χρησιμοποιήθηκε είχε πορώδες $\theta = 0.53$, μήκος $L_x = 200 [mm]$ και πλάτος $L_y = 25 [mm]$ ισοδύναμο με μεσαία τραχιά άμμος (βλέπε **Σχήμα 19**).



Σχήμα 19: Αρχική εικόνα του πορώδους μέσου αφού εισάχθηκε και αφαιρέθηκαν τα στρώματα ενδιαφέροντος.

6. Προσομοιώσεις

Πραγματοποιήθηκαν συνολικά 40 προσομοιώσεις που διήρκησαν 15 ώρες. Τα σωματίδια απελευθερώθηκαν στην είσοδο του μέσου κατανεμημένα σε μια ένα ευθύγραμμο τμήμα 10 [mm] συμμετρικά ως προς το κέντρο της εισόδου. Το σύνολο των σωματιδίων N_p ήταν 2000. Κάθε προσομοίωση είχε αρχικό χρόνο $t_0 = 0$ [min], χρονικό βήμα $t_{step} = 2$ [min] και τελικό χρόνο $t_{total} = 3500$ [min]. Η μέση ταχύτητα του ρευστού ήταν $v = 10^{-6} \left[\frac{m}{s} \right]$ και η αρχική ταχύτητα των σωματιδίων ήταν $v_p = 0 \left[\frac{m}{s} \right]$. Εκτός από αυτό, η πυκνότητα του ρευστού τέθηκε ως $\rho = 1000 \frac{kg}{m^3}$, και το δυναμικό ιξώδες $\mu = 0.01 Pa * s$.

Για την προσομοίωση της μεταφοράς σωματιδίων στο τεχνητό πορώδες μέσο, θεωρήθηκε βάση βιβλιογραφίας [James et al., 2011], πυκνότητα σωματιδίων $\rho_p = 1250 \left[\frac{kg}{m^3} \right]$. Οι προσομοιώσεις έγιναν για 8 διαφορετικές διαμέτρους σωματιδίων.

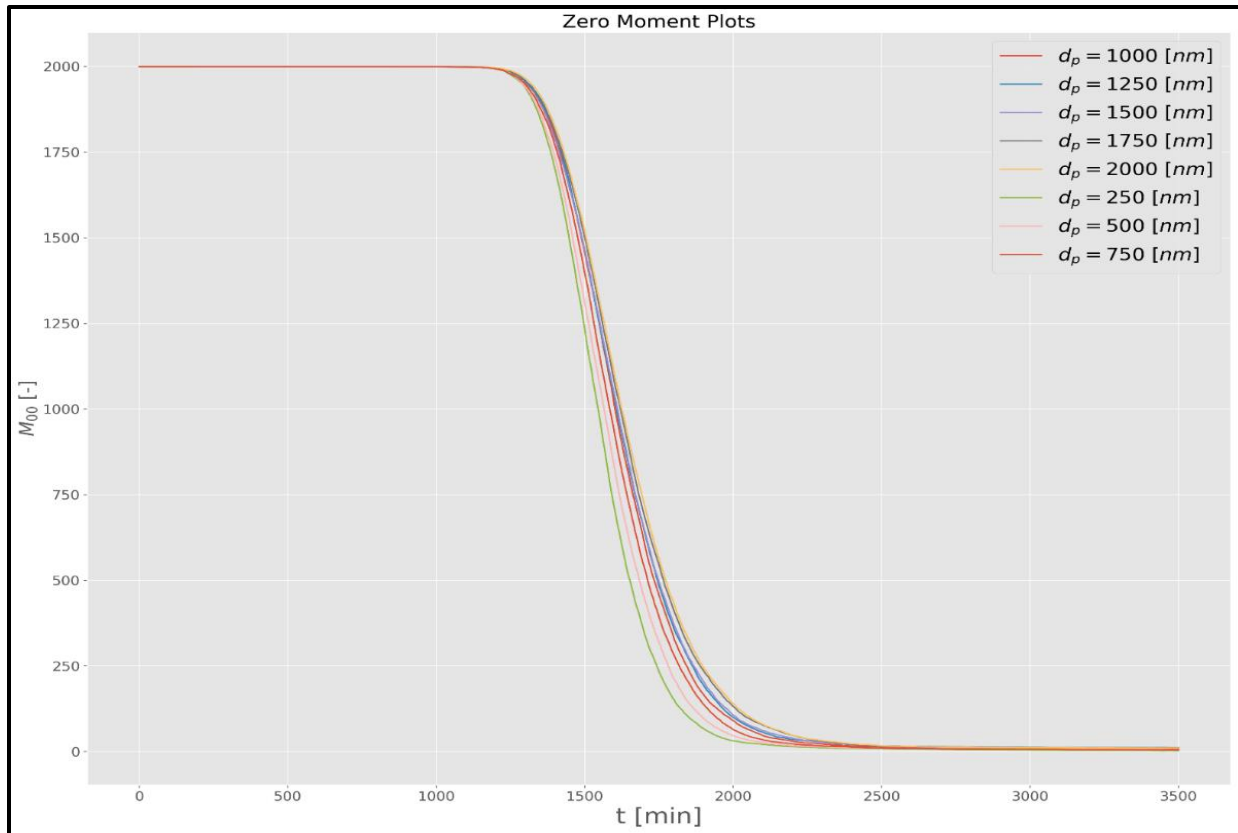
$$d_p = 250, 500, 750, 1000, 1250, 1500, 1750, 2000 [nm]$$

Για να ελαχιστοποιηθούν οι συνθήκες στις οποίες τα σωματίδια θα εγκλωβίζονταν σε συγκεκριμένες γραμμές ροής και να ελαχιστοποιηθούν τυχόν προκαταλήψεις (biases) 5 σπόροι (seeds) αρχικοποίησης της γεννήτριας τυχαίων αριθμών χρησιμοποιήθηκαν για την επίλυση της κίνησης Brown.

$$seeds = [1, 100, 142, 200, 1344, 10000]$$

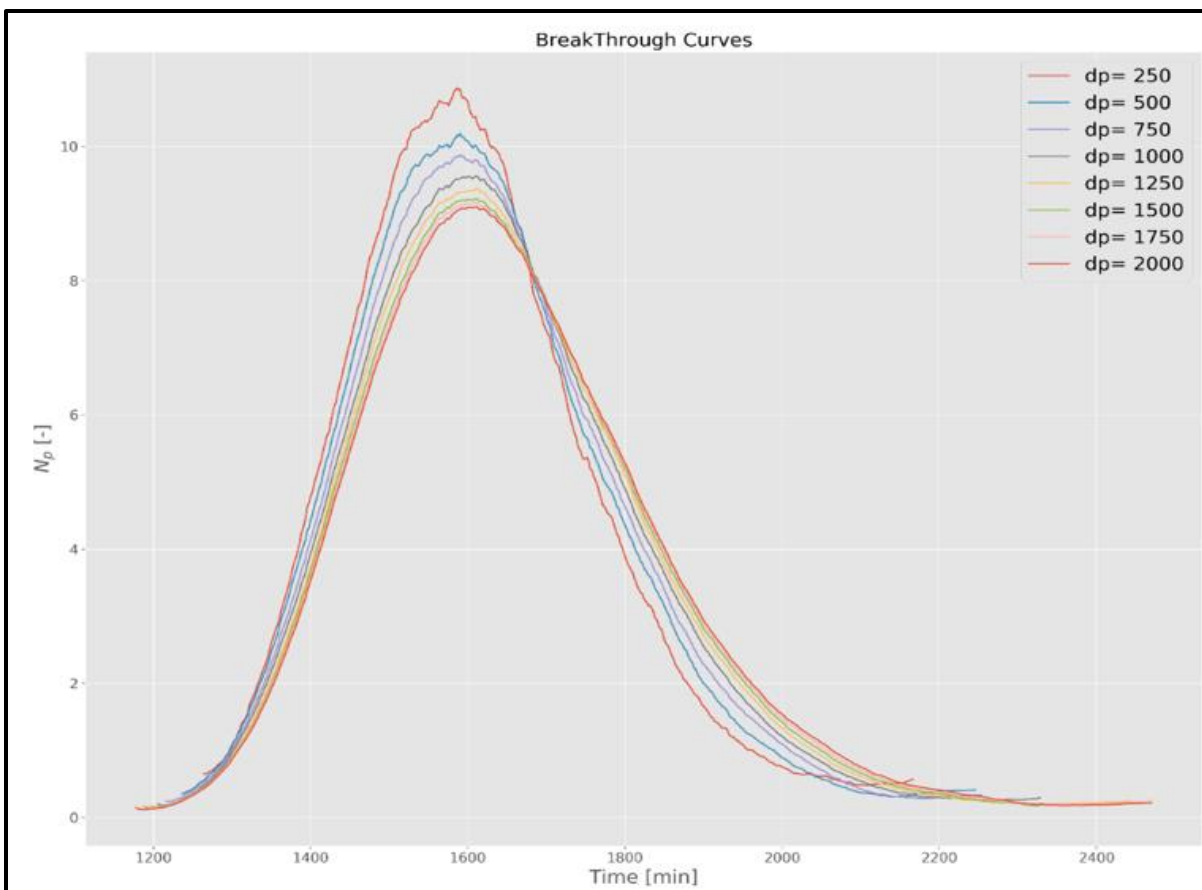
7. Αποτελέσματα-Συζήτηση

Αφού έγιναν προσομοιώσεις μέσω COMSOL ήταν δυνατή η παραγωγή σχημάτων που περιγράφουν την εξέλιξη ροπών στον χρόνο και στον χώρο τα οποία δίνονται στα παρακάτω σχήματα, **Σχήμα 20-27**. Στο **Σχήμα 20** φαίνεται η εξέλιξη της μηδενικής ροπής M_{00} στο χρόνο όπως αυτή υπολογίστηκε ξεχωριστά για σωματίδια διαμέτρων $d_p = 250, 500, 750, 1000, 1250, 1500, 1750, 2000$ nm. Ο αριθμός των σωματιδίων στο πορώδες μέσο μειώνεται ανά χρόνο και ανά διάμετρο. Επίσης, στο **Σχήμα 20** παρατηρείται ότι η μορφή της καμπύλης είναι σιγμοειδής. Βλέπουμε ότι γύρω στα 1500 *min* και μετά η έξοδος τους από το μέσο ήταν σχετικά ραγδαία. Άρα ο τελικός χρόνος της προσομοίωσης θα έπρεπε να είναι μικρότερος του 1500 *min*, ώστε να μην υπάρχει απώλεια μάζας και οι χωρικές ροπές να έχουν φυσικό νόημα. Παρότι λοιπόν η προσομοίωση διήρκησε $t_{total} = 3500$ [*min*] ο χρόνος που θα θεωρούνταν ως τελικός υπολογίστηκε ως $t_{total} = 1266$ [*min*], ο οποίος θα εξασφάλιζε το ποσοστό παραμονής 99% των σωματιδίων και τον έγκυρο υπολογισμό των στατιστικών ροπών. Επιπλέον προκειμένου τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων να προσεγγίζουν περισσότερο ημιάπειρο υδροφορέα στη x-διεύθυνση (δηλαδή να μειωθεί η επίδραση της κατάντη συνοριακής συνθήκης) όλες οι χωρικές ροπές θα υπολογίζονται σε επιφάνεια που αντιστοιχεί σε $\frac{3}{4}$ του αρχικού του μήκους. Άρα το $L_x = 200$ [*mm*] ορίζεται εκ νέου ως $L_x = 150$ [*mm*]. Επισημαίνεται ότι στο χρόνο $t_{total} = 1266$ [*min*] εξακολουθεί να υπάρχει ποσοστό παραμονής σωματιδίων 99% και άρα οι χωρικές ροπές συνεχίζουν να έχουν φυσικό νόημα.



Σχήμα 20: Οι παραπάνω σιγμοειδής καμπύλες αναπαριστούν των αριθμό των σωματιδίων που παραμένουν στο πορώδες μέσο ανά χρόνο και διάμετρο σωματιδίου

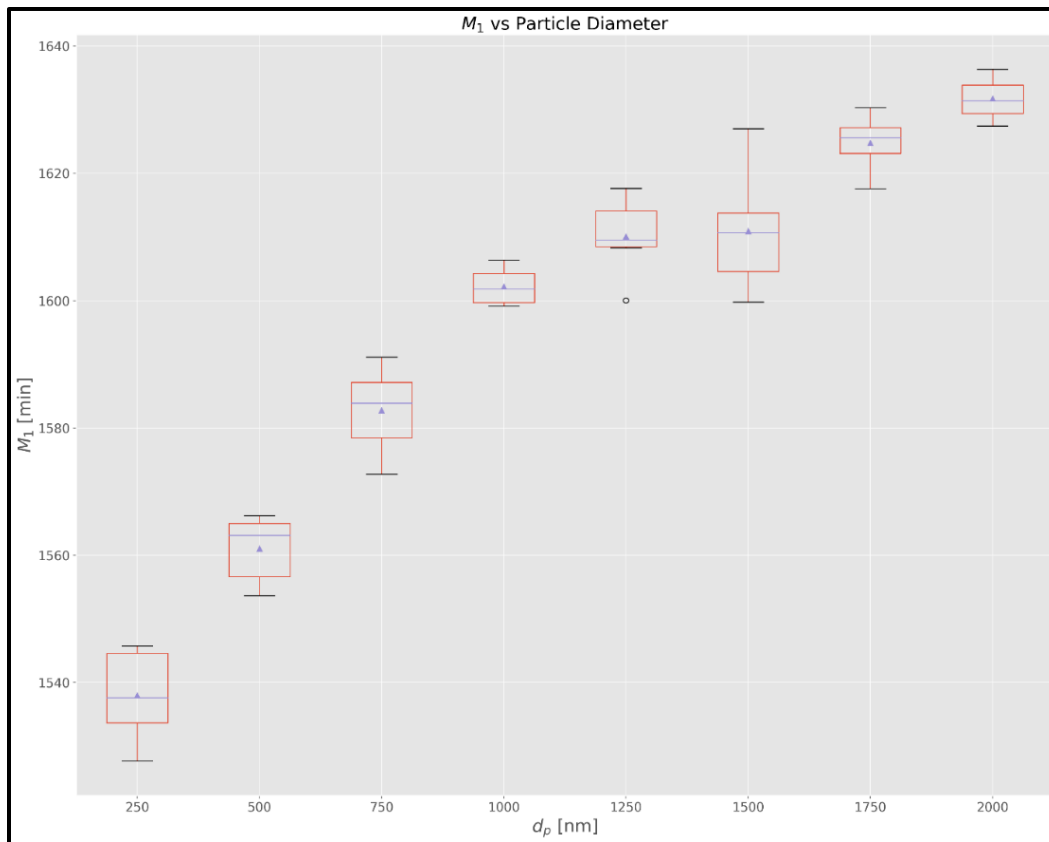
Παρόμοια συμπεράσματα εξάγονται και στο **Σχήμα 21** που παρουσιάζει τιμές της παραμέτρου N_p (αριθμό σωματιδίων) στο χρόνο για σωματίδια διαμέτρων $d_p = 250, 500, 750, 1000, 1250, 1500, 1750, 2000$ nm. Από τα 1200 min έως ~1600 min τα σωματίδια εξέρχονται του πορώδους με αυξανόμενους ρυθμούς ενώ από τα 1600 min και οι τάσεις εξόδους μειώνονται έως ότου ο χρόνος φτάσει στα 2400 min. Παρατηρείται επιπλέον ότι σωματίδια με διαφορετική διάμετρο εξέρχονται σε διαφορετικούς χρόνους, κάτι που αποδίδεται στην οπισθέλκουσα δύναμη που δρα στα σωματίδια. Αυτό φαίνεται από την μετατόπιση των κορυφών των καμπυλών προς τα δεξιά καθώς αυξάνεται η διάμετρος των σωματιδίων. Η αύξηση της οπισθέλκουσας οδηγεί και στην αύξηση του χρόνου παραμονής (**εξίσωση 5.4**) λόγω της αύξησης της μάζας τους. Τέλος παρατηρούμε ότι οι καμπύλες παρουσιάζουν μεγαλύτερη διασπορά συναρτήσει της αύξησης των σωματιδίων.



Σχήμα 21: Εδώ αναπαριστώνται οι καμπύλες εξόδου (breakthrough curves) των σωματιδίων από το πορώδες μέσο. Ξεκινά μετά τα 1200 min και τελειώνει γύρω στα 2400 min. Ο άξονας y αναπαριστά τον αριθμό σωματιδίων N_p που εξέρχονται ανά κάθε χρονική στιγμή από το πορώδες.

Στα θηκογράμματα (box-plot), **Σχήμα 22** παρουσιάζονται τα κυριότερα στοιχεία των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων της πρώτης κανονικοποιημένης χρονικής ροπής για κάθε μελετούμενη διάμετρο. Κάθε ένα θηκόγραμμα αντιπροσωπεύει έναν απλό τρόπο παρουσίασης των κυριότερων χαρακτηριστικών μια κατανομής. Στην περίπτωση μας το κάθε θηκόγραμμα περιέχει **μόνο** τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, για τους σπόρους (seeds) που ορίστηκαν στο **Κεφάλαιο 6**, για **μία** διάμετρο. Τα σημεία με τριγωνικό σχήμα αντιπροσωπεύουν την μέση τιμή του χρόνου παραμονής των σωματιδίων. Το ορθογώνιο σχήμα που εμπεριέχεται σε κάθε θηκόγραμμα αντιπροσωπεύει το 50% των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων ανά σπόρο. Η ευθεία που τέμνει το ορθογώνιο είναι η διάμεσος των αποτελεσμάτων. Από την διάμεσο έως το άνω μέρος του ορθογωνίου έχουμε το άνω 25% των αποτελεσμάτων, ενώ από τη διάμεσο έως το κάτω μέρος το υπόλοιπο 25% των αποτελεσμάτων. Οι οριζόντιες ευθείες εκτός ορθογωνίου

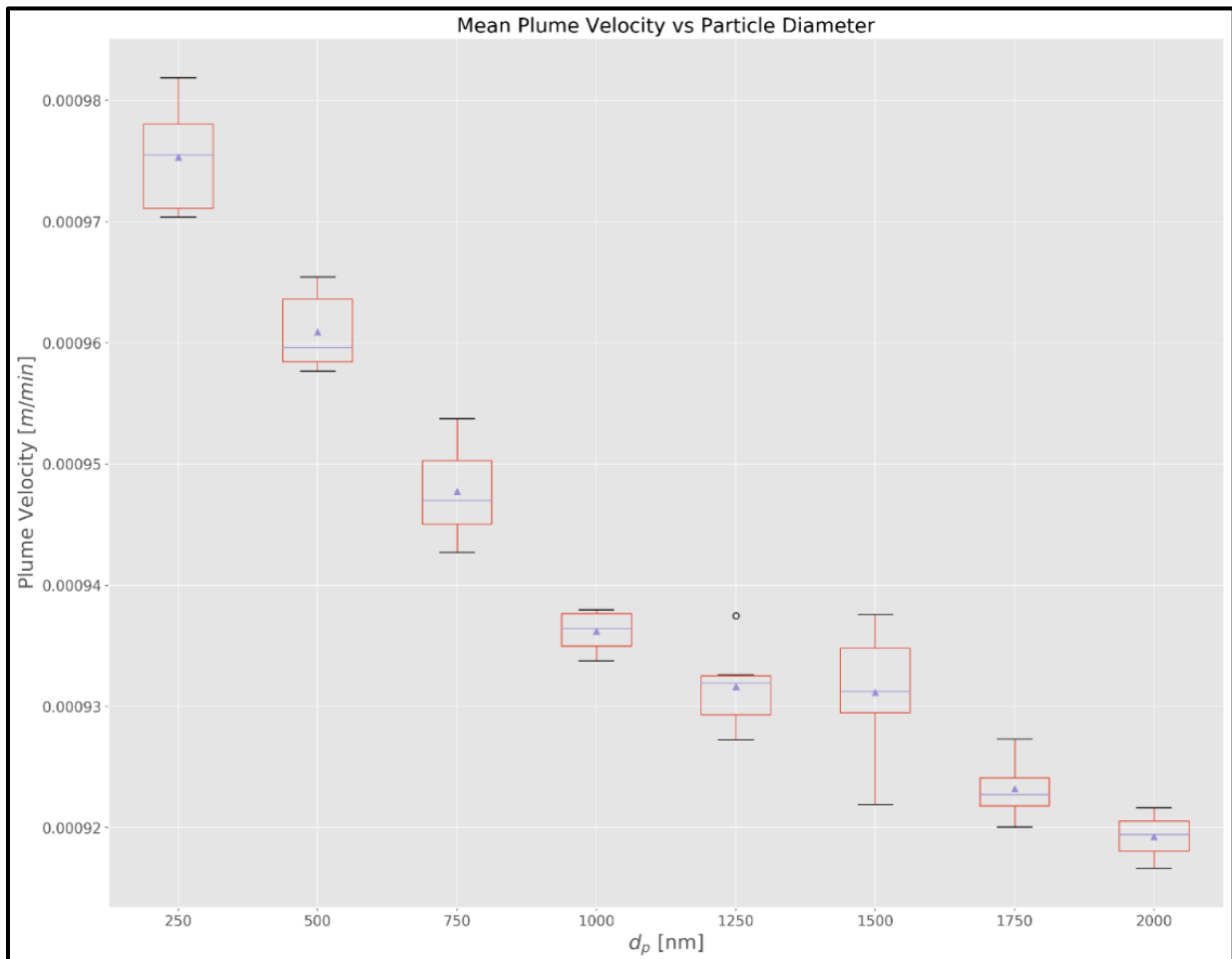
αντιπροσωπεύουν τις μέγιστες και ελάχιστες τιμές των αποτελεσμάτων που δεν θεωρούνται τιμές εκτροπής (outliers). Τέλος, τα σημεία εκείνα που βρίσκονται εκτός των προηγούμενων ορίων θεωρούνται στην παρούσα μελέτη ως τιμές εκτροπής μέγιστες ή ελάχιστες. Μια τέτοια τιμή, ελάχιστη, βρίσκεται στο κάτω όριο του θηκογράμματος της διαμέτρου 1250 nm (βλέπε **Σχήμα 22**). Παρατηρείται συνεπώς ότι υπάρχει μια αύξηση του χρόνου παραμονής των σωματιδίων στο πορώδες μέσο καθώς αυξάνεται και η διάμετρος τους. Αυτό είναι λογικό διότι καθώς αυξάνεται το μέγεθος των σωματιδίων αυξάνεται και η οπισθέλκουσα δύναμη που δρα στα σωματίδια, **εξίσωση 5.4**.



Σχήμα 22: Θηκογράμματα επίδρασης της διαμέτρου των σωματιδίων στο μέσο χρόνο παραμονής τους, 1η κανονικοποιημένη χρονική ροπή. Παρατηρείται μια γραμμική αύξηση συναρτήσει της διαμέτρου

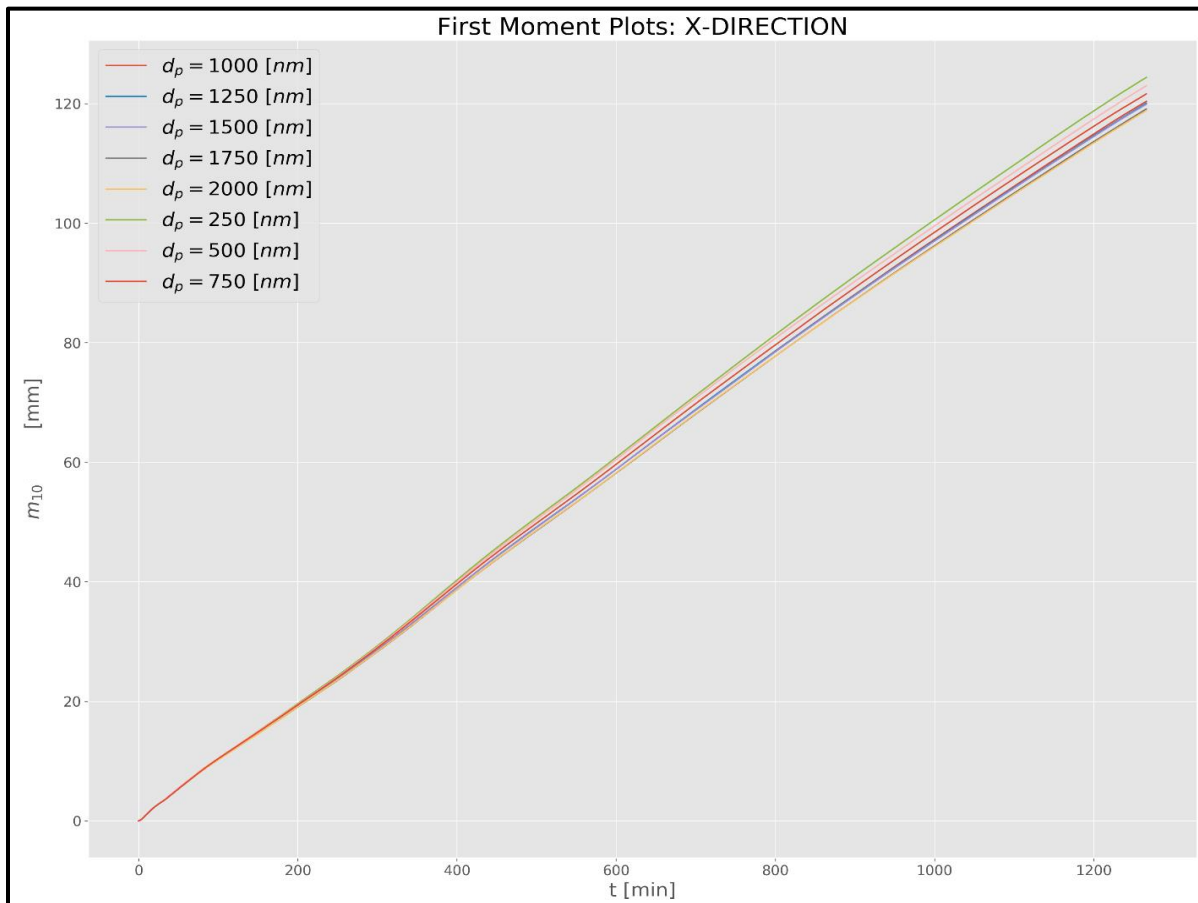
Στο **Σχήμα 23** δημιουργήθηκαν θηκογράμματα τα οποία περιγράφουν την σχέση της ταχύτητας του πλουμίου ως προς τη διάμετρο των σωματιδίων. Πάλι τα δεδομένα κάθε θηκογράμματος αντιστοιχούν στις προσομοιώσεις που έγιναν χρησιμοποιώντας μία διάμετρο και τους

αντίστοιχους τυχαίους σπόρους. Παρατηρώντας τους μέσους όρους του διαγράμματος βλέπουμε ότι υπάρχει μείωση της ταχύτητας του πλουμίου καθώς αυξάνεται η διάμετρος των σωματιδίων. Καταλήγουμε λοιπόν από το **Σχήμα 22 και 23** ότι η αύξηση του χρόνου παραμονής επιτυγχάνεται μόνο εάν αυξηθεί η διάμετρος των σωματιδίων άρα αναγκαστικά λοιπόν το πλούμιο πρέπει να κινείται πιο αργά. Τέλος, αξίζει να σημειωθεί ότι όλοι οι μέσοι όροι των ταχυτήτων ανά διάμετρο είναι μεγαλύτεροι από αυτήν της μέσης ταχύτητας του ρευστού στο μέσο $v_{plumes} > 10^{-6} \left[\frac{m}{s} \right]$.



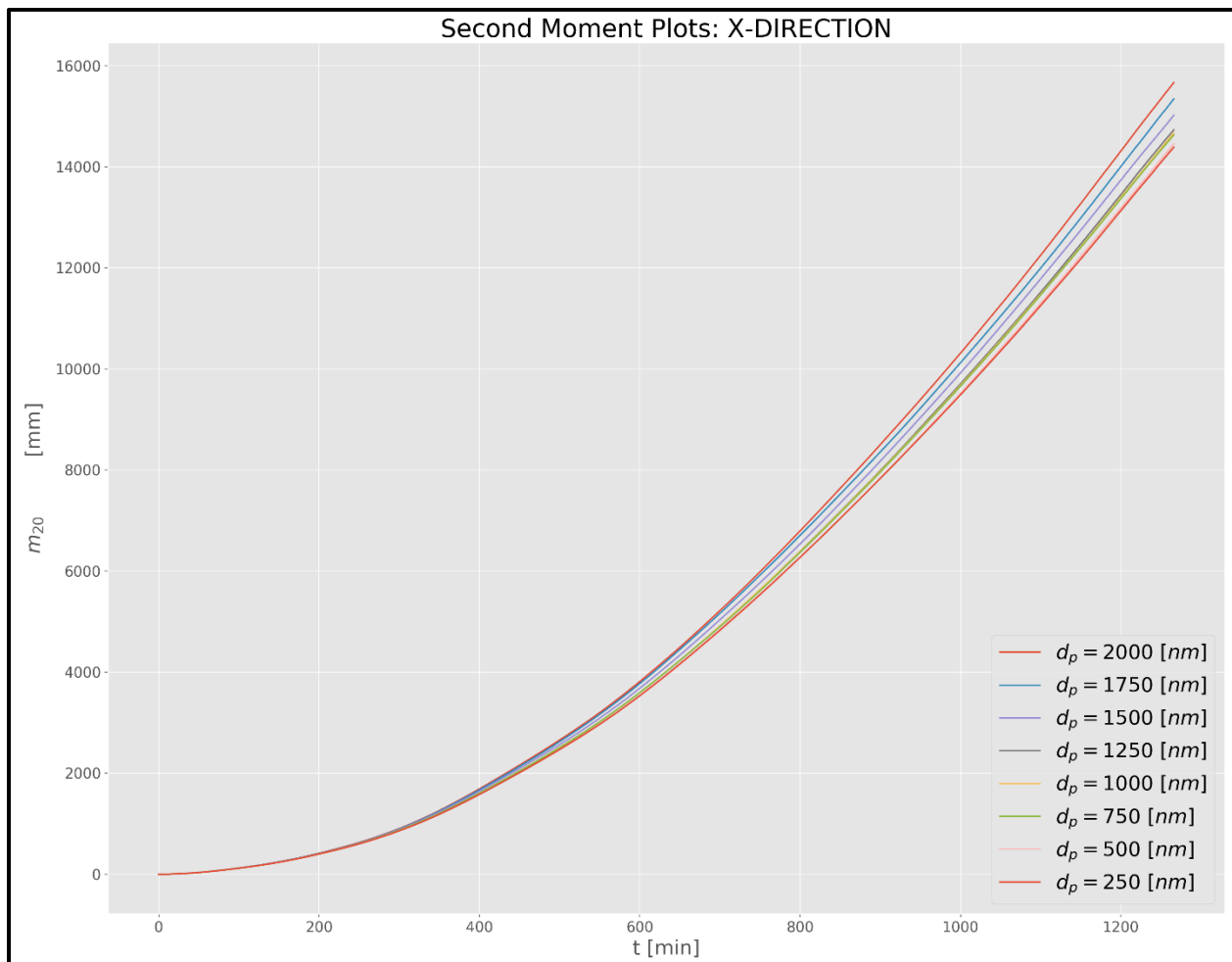
Σχήμα 23: Στο παραπάνω σχήμα παρουσιάζονται διάφορα θηκογράμματα τα οποία εκφράζουν την μέση ταχύτητα του πλουμίου εντός του πορώδους. Το καθένα από αυτά αντιστοιχεί και σε διαφορετική διάμετρο σωματιδίου. Επίσης το καθένα κατασκευάστηκε χρησιμοποιώντας προσομοιώσεις που έκαναν χρήση τους τυχαίους σπόρους.

Το **Σχήμα 24** αντιπροσωπεύει την πρώτη κανονικοποιημένη χωρική ροπή m_{10} ως προς τον x άξονα (κατεύθυνση κύριας ροής). Παρουσιάζει την κίνηση του πλουμίου κατά την διεύθυνση x καθώς περνά ο χρόνος. Φαίνεται ότι το πλούμιο για όλες τις περιπτώσεις διαμέτρων σωματιδίων κινείται γραμμικά έως το όριο των 150 [mm] που ορίσαμε προηγουμένως ως το νέο εικονικό μήκος του πορώδους. Παρατηρείται ότι από 400 min και μετά οι κλίσεις των ευθειών αλλάζουν και η διαφοροποίηση τους γίνεται πιο ευκρινείς. Οι κλίσεις αυτές δίνουν την μέση ταχύτητα του πλουμίου ανά διάμετρο όπως απεικονίζεται και στο **Σχήμα 23** και περιγράφεται στο **Κεφάλαιο 4.1.3.1**. Η συσχέτιση μεταξύ διαμέτρου και m_{10} στην περίπτωση μας δεν είναι θετική. Δηλαδή, στην περίπτωση της διαμέτρου σωματιδίου 250 nm παρατηρείται ότι η κλίση της ευθείας είναι μεγαλύτερη από τις υπόλοιπες. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι η οπισθέλκουσα δύναμη μειώνεται με την αύξηση της διαμέτρου.



Σχήμα 24: Εδώ παρατηρείται η μεταφορά του πλουμίου κατά την διεύθυνση της κύριας ροής, x . Αυτή η μεταφορά υπολογίστηκε χρησιμοποιώντας την πρώτη κανονικοποιημένη χωρική ροπή. Κάθε μια ευθεία αντιστοιχεί και σε μία διάμετρο σωματιδίου.

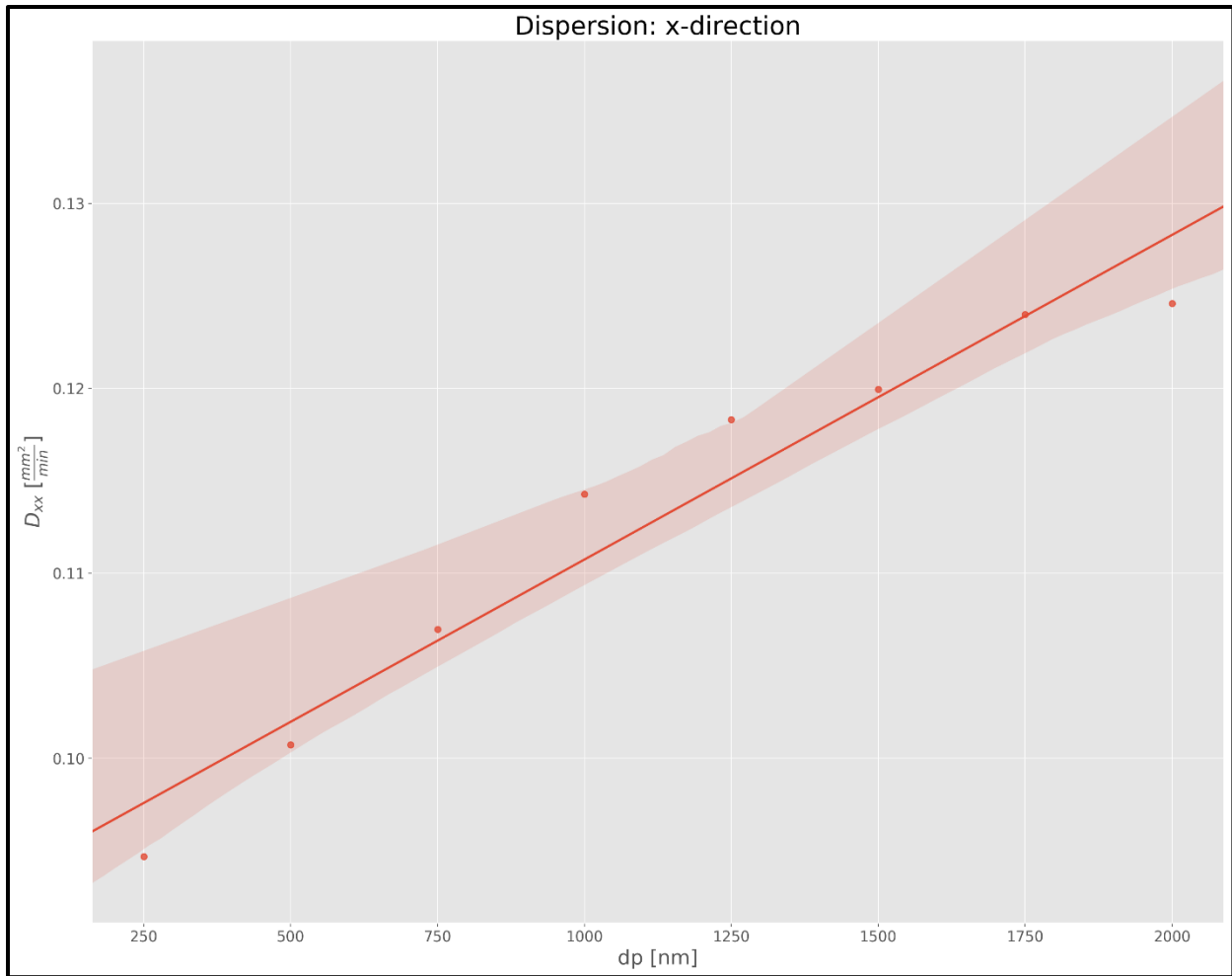
Στη συνέχεια υπολογίστηκαν οι κανονικοποιημένες χωρικές ροπές 2^{ης} τάξης m_{20} , όπως απεικονίζεται στο **Σχήμα 25**, ως προς την κατεύθυνση της κύριας ροής μέσω της **εξίσωσης 4.5**. Παρατηρείται μια παραβολική αύξηση της χωρικής διασποράς του ρύπου καθώς κινείται το πλούμιο προς την έξοδο, το οποίο είναι προφανές λόγω της τετραγώνισης της χωρικής ροπής $n=2$ **Εξίσωση 4.5**. Επίσης, αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι λόγω της μεταβολής της οπισθέλκουσας δύναμης στις γραμμές ροής μερικά σωματίδια κατακρατούνται πίσω, ενώ άλλα προωθούνται. Έτσι, αυξάνεται η εξάπλωσή τους στον χώρο συναρτήσει της αύξησης του μεγέθους τους.



Σχήμα 25: Εδώ παρουσιάζονται οι 2^{ης} τάξης κανονικοποιημένες χωρικές ροπές ως προς την διεύθυνση κύριας ροής. Κάθε μία καμπύλη αντιπροσωπεύει και μία διάμετρο σωματιδίου.

Παίρνοντας υπόψιν το γεγονός ότι η χωρική ροπή 2^{ης} τάξης έδειξε διαφοροποίηση καθώς άλλαζαν οι διάμετροι των σωματιδίων και χρησιμοποιώντας την **εξίσωση 4.9** μπορούμε πλέον συνδυάζοντας τα δεδομένα από το **Σχήμα 24**, της κανονικοποιημένης χωρικής ροπής 1^{ης} τάξης αυτά από το **Σχήμα 25** (2^{ης} τάξης κανονικοποιημένη χωρική ροπή) να υπολογίσουμε την υδροδυναμική διασπορά των σωματιδίων στο πορώδες μέσο (βλέπε **Σχήμα 26**).

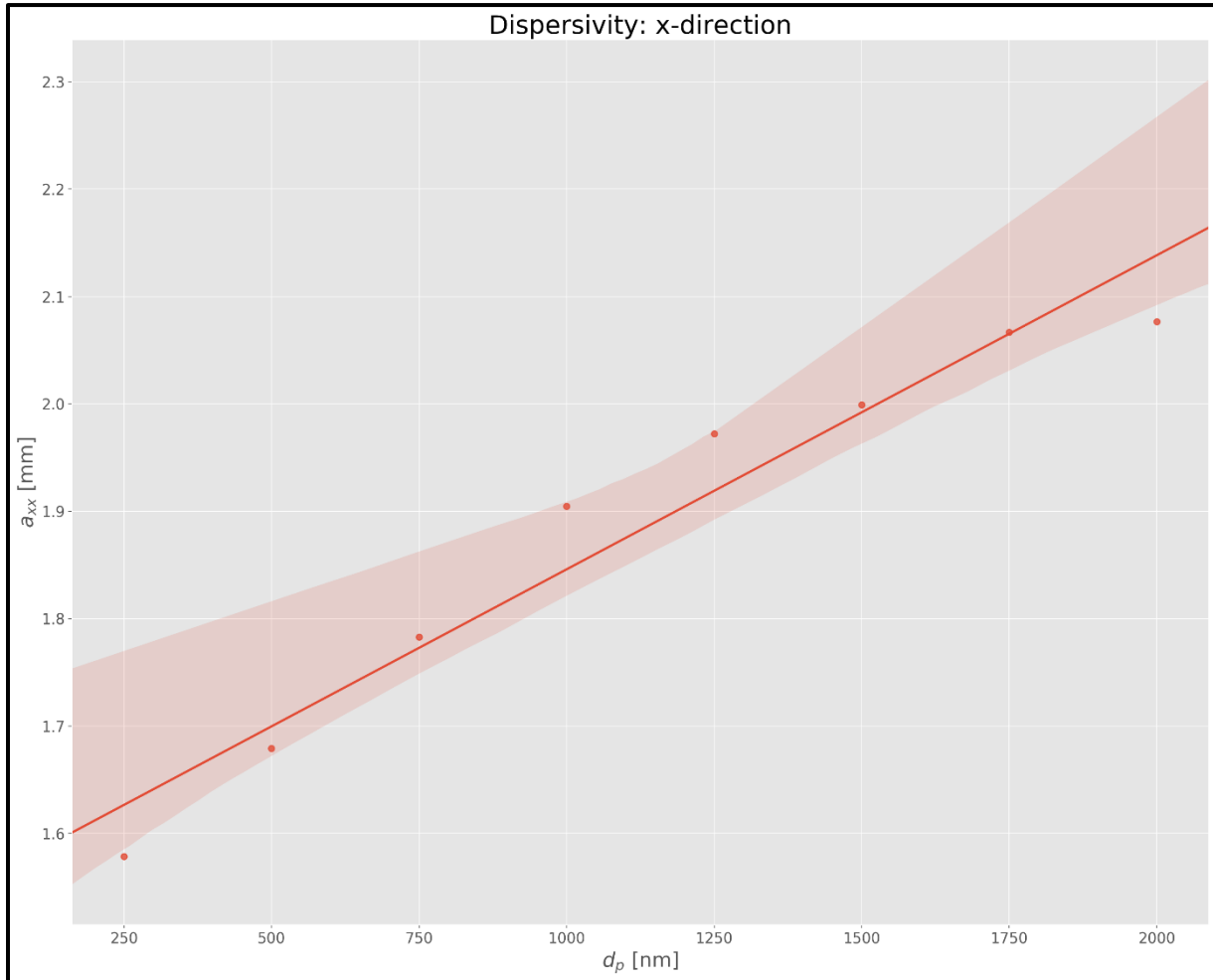
Στο **Σχήμα 26** παρατηρούμε τη σχέση της υδροδυναμικής διασποράς συναρτήσει του μεγέθους των σωματιδίων. Στο σχήμα αυτό υπολογίστηκε η ευθεία γραμμικής παλινδρόμησης (κόκκινη ευθεία) για λόγους ποιοτικού ελέγχου των αποτελεσμάτων. Το κόκκινο πεδίο αντιπροσωπεύει το διάστημα πρόβλεψης (confidence bands) των σημείων, το οποίο υπολογίστηκε χρησιμοποιώντας 68% διάστημα εμπιστοσύνης. Όπως παρατηρούμε το διάστημα ήταν αρκετά συμπεσμένο υποστηρίζοντας έτσι ότι τα σημεία δεν αποκλίνουν παρά μόνο ένα. Η ευθεία αυτή φανερώνει ότι καθώς αυξάνεται το μέγεθος των σωματιδίων τότε αυξάνεται και η υδροδυναμική διασπορά τους. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι μεγαλύτερα σωματίδια δέχονται μεγαλύτερες δυνάμεις από την ροή (η οπισθέλκουσα δύναμη μειώνεται με την μείωση του μεγέθους) και συνεπώς επηρεάζονται πολύ περισσότερο από τις διακυμάνσεις του πεδίου ταχύτητας.



Σχήμα 26: Στο σχήμα αυτό παρουσιάζεται η σχέση μεταξύ υδροδυναμικής διασποράς και διαμέτρου σωματιδίου. Η κόκκινη ευθεία αντιπροσωπεύει την σχέση μεταξύ των δύο παραμέτρων και δημιουργήθηκε χρησιμοποιώντας γραμμική παλινδρόμηση. Επίσης το κόκκινο πεδίο άνω και κάτω της ευθείας παλινδρόμησης αντιπροσωπεύει το σφάλμα των σημείων.

Το τελευταίο βήμα της ανάλυσης αυτής της μελέτης ήταν να υπολογιστούν οι τάσεις διασποράς κατά την κατεύθυνση της κύριας ροής x και να συγκριθούν με αυτά που έδειξε η βιβλιογραφία [Chrysikopoulos and Katzourakis, 2015]. Στο **Σχήμα 27** παρουσιάζονται οι τάσεις διασποράς συναρτήσει του μεγέθους των σωματιδίων που υπολογίστηκαν μέσω της εξίσωσης 4.9 και χρησιμοποιώντας τα δεδομένα από το **Σχήμα 26**.

Επίσης, στην περίπτωση της διαμέτρου σωματιδίου $d_p = 2000$ [nm] εμφανίζεται και αυτό ως σημείο εκτροπής (outlier) ομοίως και στο **Σχήμα 26** για την ίδια διάμετρο. Όπως ήταν αναμενόμενο οι παράμετροι a_{xx} (τάσης διασποράς) έχουν παρόμοια συμπεριφορά με αυτή της υδραυλικής διασποράς **Σχήμα 26**, καθώς συνδέονται με γραμμική σχέση, εξίσωση **4.9**.



Σχήμα 27: Στο σχήμα αυτό παρουσιάζεται η σχέση μεταξύ τάσης διασποράς και διαμέτρου σωματιδίου. Η κόκκινη ευθεία αντιπροσωπεύει την σχέση μεταξύ των δύο παραμέτρων και δημιουργήθηκε χρησιμοποιώντας γραμμική παλινδρόμηση. Επίσης το κόκκινο πεδίο άνω και κάτω της ευθείας παλινδρόμησης αντιπροσωπεύει το σφάλμα των σημείων.

8. Συμπεράσματα

Στην παρούσα εργασία έγινε προσπάθεια να μελετηθεί η συμπεριφορά μεταφοράς σωματιδίων διαφορετικού μεγέθους σε δισδιάστατο πορώδες μέσω. Χρησιμοποιώντας ανάλυση ροπών στα αποτελέσματα πολλαπλών προσομοιώσεων προέκυψαν τα παρακάτω χρήσιμα συμπεράσματα.

1. Η οπισθέλκουσα δύναμη που ασκείται από το πεδίο ροής στα σωματίδια αυξάνεται με την αύξηση του μεγέθους των σωματιδίων.
2. Τα μεγαλύτερα σωματίδια επηρεάζονται περισσότερο από τις διακυμάνσεις του πεδίου των ταχυτήτων, καθώς επιδρά σε αυτά με πιο ισχυρό τρόπο η οπισθέλκουσα δύναμη.
3. Τα μεγαλύτερα σωματίδια έχουν μεγαλύτερη υδροδυναμική διασπορά από ότι τα μικρότερα, καθώς επηρεάζονται περισσότερο από τις διακυμάνσεις της ανεπτυγμένης μόνιμης ροής. Το αποτέλεσμα αυτό επιβεβαιώνεται και πειραματικά από [Chrysikopoulos and Katzourakis, 2015]
4. Το κέντρο μάζας των μικρότερων σωματιδίων ταξιδεύει με μεγαλύτερη ταχύτητα από ότι ταξιδεύει το αντίστοιχο κέντρο των μεγαλύτερων σωματιδίων, αφού ασκείται σε αυτά μικρότερη οπισθέλκουσα δύναμη.
5. Ο μέσος χρόνος παραμονής εντός του πορώδους αυξάνεται με την αύξηση της διαμέτρου των σωματιδίων, καθώς η μέση ταχύτητα των μεγαλύτερων σωματιδίων είναι πιο μικρή από την αντίστοιχη των μικρότερων σωματιδίων.
6. Σε κάθε περίπτωση οι μέσες ταχύτητες του κέντρου βάρους όλων των σωματιδίων είναι μεγαλύτερες από την μέση ενδοπορώδη ταχύτητα του ρευστού.

Βιβλιογραφία

1. Aris, R. (1956), On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube, Proc. R. Soc. London, Ser. A, 235, 67–78.
2. Freyberg, D. L. (1986), A natural gradient experiment on solute transport in a sand aquifer: 2. Spatial moments and the advection and dispersion of nonreactive tracers, Water Resour. Res., 22(13), 2031–2046.
3. Goltz, M.N. and P.V. Roberts (1987), Using the method of moments to analyze three-dimensional diffusion-limited solute transport from temporal and spatial perspectives, Water Resour. Res., 23(8), 1575–1585.
4. James, S.C., and C.V. Chrysikopoulos (2011), Monodisperse and polydisperse colloid transport in water-saturated fractures with various orientations: Gravity effects, Adv. Water Resour., 34, 1249–1255, doi:10.1016/j.advwatres.2011.06.001.
5. Singha, K., Gorelick, S.M. (2005), Saline tracer visualized with three-dimensional electrical resistivity tomography: field-scale spatial moment analysis, Water Resour. Res., 41, W05023.
6. Mehmani, Y., and M. T. Balhoff (2015), Eulerian network modeling of longitudinal dispersion, Water Resour. Res., 51, doi:10.1002/2015WR017543.
7. Chrysikopoulos, C. V., and V. E. Katzourakis (2015), Colloid particle size-dependent dispersivity, Water Resour. Res., 51, 4668–4683, doi:10.1002/2014WR016094.
8. Bird, R. Byron (Robert Byron), 1924- Transport phenomena / R. Byron Bird, Warren E. Stewart, Edwin N. Lightfoot.-2nd ed.
9. Χρυσικόπουλος, Κ.Β 2013, Εισαγωγή στις διεργασίες καθαρισμού νερού και λυμάτων, Εκδόσεις Τζιόλα ISBN 978-960-418-396-8.
10. Χρυσικόπουλος, Κ.Β 2013, Φαινόμενα Μεταφοράς Ρύπων στο Υπέδαφος, Πανεπιστημιακές Σημειώσεις (Μεταπτυχιακού Προγράμματος Σπουδών Σχολής Μηχανικών Περιβάλλοντος), Πολυτεχνείο Κρήτης.
11. Pereira Nunes, J. P., B. Bijeljic, and M. J. Blunt (2016), Pore-space structure and average dissolution rates: A simulation study, Water Resour. Res., 52, 7198-7212, doi:10.1002/2016WR019313.

12. Naftaly, A., I. Dror, and B. Berkowitz (2016), Measurement and modeling of engineered nanoparticle transport and aging dynamics in a reactive porous medium, *Water Resour. Res.*, 52, 5473-5491, doi:10.1002/2016WR018780.
13. Batu, Vedat Applied flow and solute transport modeling in aquifers : fundamental principles and analytical and numerical methods / Vedat Batu. ISBN 0-8493-3574-4 (alk. Paper)
14. Βασίλειος Ε. Κατζουράκης, Προσομοίωση Μεταφοράς Ρυπών Σε Πορώδη Μέσα, 2010
15. Βασίλειος Ε. Κατζουράκης, 2012, Αριθμητική Μοντελοποίηση Συμμεταφοράς Βιοκολλοειδών - Κολλοειδών Σωματιδίων Σε Τρισδιάστα Πορώδη Μέσα: 2012, <http://tuceel.isc.tuc.gr/Publications/dissertations/Katzourakis-MS-12.pdf>
16. Χρυσικόπουλος, Κ. Β. (2010). Ειδικά Θέματα Τεχνολογίας του Περιβάλλοντος. Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών.
17. Χρυσικόπουλος, Κ. Β. (2013). Εισαγωγή στις διεργασίες καθαρισμού νερού και λυμάτων. ΤΖΙΟΛΑ.
18. Einstein, A. (1956). *Investigations on the Theory of the Brownian Movement*. Dover Publications New York.
19. Bear, J., *Hydraulics of Ground water*, McGraw-Hill, New York, 1979
20. Bear J. *Modelling and Applications of Transport Phenomena in Porous Media*, 1987
21. Richard W. Hamming, *The art of probability: for scientists and engineers* Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc. Boston, MA, USA ©1991
22. Chrysikopoulos, C. V., E. A. Voudrias, and M. M. Fyrrillas (1994), Modeling contaminant transport resulting from dissolution of nonaqueous phase liquid pools in saturated porous media, *Transp. Porous Media*, 16, 125–145, doi:10.1007/BF00617548.
23. Syngouna, V.I., C.V. Chrysikopoulos, P. Kokkinos, M.A. Tselepi, And A. Vantarakis, Cotransport of human adenoviruses with clay colloids and tio2 nanoparticles in saturated porous media: Effect of flow velocity, *Science of the Total Environment*, 598, 160–167, doi:10.1016/j.scitotenv.2017.04.082, 2017
24. Syngouna, V.I., and C.V. Chrysikopoulos, Experimental investigation of virus and clay particles cotransport in partially saturated columns packed with glass beads, *Journal of Colloid and Interface Science*, 440, 140–150, doi:10.1016/j.jcis.2014.10.066, 2015.

25. Chrysikopoulos, c.v., and v.i. Syngouna, effect of gravity on colloid transport through water-saturated columns packed with glass beads: modeling and experiments, *environmental science and technology*, 48, 6805–6813, doi:10.1021/es501295n, 2014.
26. Mitropoulou, p.n., v.i. Syngouna, and c.v. Chrysikopoulos, transport of colloids in unsaturated packed columns: Role of ionic strength and sand grain size, *Chemical Engineering Journal*, 232, 237–248, doi:10.1016/j.cej.2013.07.093, 2013.

Βιβλιογραφία Διαδικτυακή

1. <https://www.comsol.com/videos>
2. <http://people.ee.ethz.ch/~fieldcom/pps-comsol/documents/User%20Guide/COMSOLMultiphysicsUsersGuide.pdf>
3. <http://www.lmn.pub.ro/~daniel/ElectromagneticModelingDoctoral/Books/COMSOL4.3/particle/ParticleTracingModuleUsersGuide.pdf>
4. https://lost-contact.mit.edu/afs/pdc.kth.se/roots/ilse/v0.7/pdc/vol/comsol/4.4.248/doc/pdf/Particle_Tracing_Module/IntroductionToParticleTracingModule.pdf
5. https://www.researchgate.net/figure/273500329_fig2_Figure-3-Dimensionless-dispersion-coefficients-D-D-versus-the-Peclet-number-11-L-d
6. <http://lorenabarba.com/blog/cfd-python-12-steps-to-navier-stokes/>
7. <https://github.com/gpamfilis/mediapack>

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α: Κώδικας για την δημιουργία του πορώδους μέσου

```
1. # coding: utf-8
2.
3. """
4. A 2D porous media generator.
5. """
6.
7. import matplotlib.pyplot as plt
8. import numpy as np
9. import ezdxf
10.
11. __author__ = 'George Pamfilis'
12.
13. class Random2DIsotropic(object):
14.     def __init__(self, height=[0., 20.], width=[0., 200.], radius_range=[0.5, .1], number_of_particles=60.,
15.                 fname='test.png', grain_dist='norm'):
16.         self.height = height
17.         self.width = width
18.         self.radius_range = radius_range
19.         self.number_of_particles = number_of_particles
20.         self.fname = fname
21.         self.grain_dist=grain_dist
22.         self.margin = 2
23.         self.offset=None
24.
25.     def create_random_porous_media_uniform(self):
26.         xx = np.random.uniform(self.width[0]+1, self.width[1]-1, (self.number_of_particles, self.number_of_particles))
27.         yy = np.random.uniform(self.height[0]+1, self.height[1]-1, (self.number_of_particles, self.number_of_particles))
28.         rr = np.random.uniform(self.radius_range[0], self.radius_range[1], (self.number_of_particles, self.number_of_particles))
29.         return xx, yy, rr
30.
31.     def create_random_porous_media_normal(self):
32.         xx = np.random.uniform(self.width[0]+1, self.width[1]-1, (self.number_of_particles, self.number_of_particles))
33.         yy = np.random.uniform(self.height[0]+1, self.height[1]-1, (self.number_of_particles, self.number_of_particles))
34.         rr = np.random.normal(self.radius_range[0], self.radius_range[1], (self.number_of_particles, self.number_of_particles))
35.         return xx, yy, rr
36.
37.
38.
39.     def compute_porosity(self):
40.         xx,yy,rr = self.create_random_porous_media_normal()
41.         return theta
42.
43.
44.     def draw_media(self):
45.         if self.grain_dist == 'norm':
46.             xx, yy, rr = self.create_random_porous_media_normal()
47.         else:
48.             xx, yy, rr = self.create_random_porous_media_uniform()
49.         plt.figure(figsize=(20, 20 * (self.height[1] / self.width[1])))
50.         fig = plt.gcf()
51.         for j in range(xx.shape[0]):
52.             for i in range(xx[j].shape[0]):
```

```

53.         circle1 = plt.Circle((xx[j][i], yy[j][i]), rr[i][j], color='r')
54.         fig.gca().add_artist(circle1)
55.     # fig.show()
56.     # fig.show()
57.     plt.xlim(0, self.width[1])
58.     plt.ylim(0, self.height[1])
59.     plt.show()
60.     plt.savefig(self.fname)
61.     return xx, yy, rr
62.
63.     def export_dfx(self):
64.         xx,yy,rr = self.draw_media()
65.         self.offset = np.max(rr)
66.
67.         width = self.width[1]#+(2*self.offset*self.margin)
68.         height = self.height[1]#t+(2*self.offset*self.margin)
69.
70.         dwg = ezdxf.new('AC1015')
71.         dwg.layers.new(name='frame')
72.         dwg.layers.new(name='media')
73.
74.         msp = dwg.modelspace()
75.
76.         points = [(0,0), (width,0), (width,height), (0, height),(0,0)]
77.         msp.add_lwpolyline(points, dxfattribs={'layer':'frame'})
78.         #
79.         for j in range(xx.shape[0]):
80.             for i in range(xx[j].shape[0]):
81.                 msp.add_circle((xx[j][i],yy[j][i]),rr[i][j], dxfattribs={'layer':'media'})
82.         dwg.saveas('/home/kasper/Dropbox/SHARED PROJECTS/random_media.dxf')
83.
84.
85.
86.
87.
88.
89.
90.     class Random2DIsotropic2(object):
91.         def __init__(self, height=[0., 20.], width=[0., 200.], radius_range=[0.5, .1], nx=60, ny=50,number_of_particles=10,
92.             fname='test.png', grain_dist='norm'):
93.             self.height = height
94.             self.width = width
95.             self.radius_range = radius_range
96.             self.number_of_particles = number_of_particles
97.             self.fname = fname
98.             self.grain_dist=grain_dist
99.             self.margin = 2
100.            self.offset=None
101.            self.nx=nx
102.            self.ny=ny
103.            self.theta = None
104.
105.            def create_random_porous_media_uniform(self):
106.                x,y = np.linspace(*self.width, num=self.nx), np.linspace(*self.height, num=self.ny)
107.
108.
109.                xx, yy = np.meshgrid(x,y)
110.                print(xx.shape)
111.                print(yy.shape)
112.
113.                #shift x to the right every two

```



```

114. # for i in range(0,xx.shape[0],2):
115. #     print(i)
116. #     xx[i] = xx[i]+(self.width[1]/self.nx)/2
117.
118. #shift y to the right every two
119. for i in range(0,xx.shape[0]):
120.     for j in range(0,yy[i].shape[0],2):
121.         yy[i][j] = yy[i][j]+(self.height[1]/self.ny)/2
122. rr = np.random.uniform(self.radius_range[0], self.radius_range[1], (self.nx, self.ny))
123. return xx, yy, rr
124.
125.
126. def compute_porosity(self, rr):
127.     totalV = self.width[1]*self.height[1]
128.     print(np.pi)
129.     partials = []
130.     for r in rr:
131.         partial = np.sum(np.pi*r**2)
132.         partials.append(partial)
133.     grain_area = sum(partials)
134.     print(grain_area)
135.     print(totalV)
136.     theta= (totalV-grain_area)/totalV
137.     print(theta)
138.     return theta
139. def draw_media(self, xx,yy,rr):
140.     # if self.grain_dist == 'norm':
141.     #     xx, yy, rr = self.create_random_porous_media_normal()
142.     # else:
143.     #     xx, yy, rr = self.create_random_porous_media_uniform()
144.     self.theta = self.compute_porosity(rr)
145.     # for i in range(xx[0].shape[0]):
146.
147.
148.     plt.figure(figsize=(20, 20 * (self.height[1] / self.width[1])))
149.     fig = plt.gcf()
150.     for j in range(xx.shape[0]):
151.         for i in range(xx[j].shape[0]):
152.             circle1 = plt.Circle((xx[j][i], yy[j][i]), rr[i][j], color='r')
153.             fig.gca().add_artist(circle1)
154.     # fig.show()
155.     # fig.show()
156.     ad = 0#np.max(rr)*self.margin*2
157.     plt.xlim(0-ad, self.width[1]+ad)
158.     plt.ylim(0-ad, self.height[1]+ad)
159.     plt.show()
160.     # plt.savefig(self.fname)
161.     return xx, yy, rr
162.
163. def gerate_given_porosity(self, porosity):
164.
165.     while porosity>theta:
166.         theta = self.compute_porosity(rr)
167.     pass
168.
169.
170. def export_dfx(self):
171.     xx, yy, rr = self.create_random_porous_media_uniform()
172.     # self.draw_media(xx, yy, rr)
173.     # xx, yy, rr = self.create_random_porous_media_uniform()
174.     self.theta = self.compute_porosity(rr)

```

```

175.
176.     self.offset = np.max(rr)
177.     width = self.width[1]#+(2*self.offset*self.margin)
178.     height = self.height[1]#t+(2*self.offset*self.margin)
179.
180.     dwg = ezdxf.new('AC1015')
181.     dwg.layers.new(name='frame')
182.     dwg.layers.new(name='media')
183.     msp = dwg.modelspace()
184.
185.
186.
187.
188.
189.
190.     # points = [(0-self.offset,0), (width+self.offset,0), (width+self.offset,height), (0-self.offset, height),(0-
self.offset,0)]
191.     points = [(0,0), (width+(2.5*self.offset), 0), (width+(2.5*self.offset), height), (0, height),(0,0)]
192.
193.     msp.add_lwpolyline(points, dxfattribs={'layer':'frame'})
194.     #
195.     for j in range(xx.shape[0]):
196.         for i in range(xx[j].shape[0]):
197.             msp.add_circle((xx[j][i]+self.offset, yy[j][i]), rr[i][j], dxfattribs={'layer':'media'})
198.             # TODO: add datetime to media name
199.             dwg.saveas('/home/kasper/Dropbox/SHARED PROJECTS/random_media_'+str(round(self.theta,2))+'_w_'+str(wid
th)+'_h_'+str(height)+'.dxf')
200.             return self.theta
201.
202. if __name__ == '__main__':
203.     # default values
204.     # height = [0, 25]
205.     # width = [0, 200]
206.     # radius_range = [0.25, 0.6]
207.     # number_of_particles = 10
208.     # nx=160
209.     # ny=20
210.     factorx = 1
211.     factory = 1
212.     height = [0, 25*factory]
213.     width = [0, 200*factorx]
214.     radius_range = [0.25, 0.25]
215.     # number_of_particles = 10
216.     nx=(160*factorx)+200
217.     ny=20*factory + 10
218.     # Random2DIsotropic2(height, width, radius_range, number_of_particles).export_dfx()
219.     # Random2DIsotropic2(height, width, radius_range, nx, ny).export_dfx()
220.     media = Random2DIsotropic2(height, width, radius_range, nx, ny)
221.     a = media.create_random_porous_media_uniform()
222.     # media.draw_media(*a)
223.
224.     print(media.compute_porosity(a[-1]))
225.     media.export_dfx()
226.     # media.draw_media(*a)
227.     # for r in np.linspace(0.25,0.5,10):
228.     #     Random2DIsotropic(height, width, [r,0.6], nx, ny).export_dfx()
229.
230.     # Random2DIsotropic(height, width, radius_range, nx, ny).compute_porosity()

```

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β: Κώδικας υπολογισμού των στατιστικών ροπών

```
1. import os
2. import particles
3. import numpy as np
4. import pandas as pd
5.
6. def get_seeds(directory):
7.     seeds = []
8.     for a in os.listdir(directory):
9.         try:
10.            seeds.append(int(a.split('_')[1]))
11.        except Exception as e:
12.            print(e)
13.     return seeds
14.
15. def get_data_paths(directory, seeds):
16.     particle_data_file = []
17.     for seed in seeds:
18.         pos = os.listdir(directory+'seed_'+str(seed))
19.         particle_data_file.append([directory+'seed_'+str(seed)+'/' + p for p in pos if '.DS_Store' not in p])
20.     empty = {}
21.     for i, seed in enumerate(seeds):
22.         empty[str(seed)] = particle_data_file[i]
23.     return empty
24.
25. def zero_moment(pos):
26.     m0 = []
27.     for i in range(pos.shape[1]):
28.         x_data = pos[i]
29.         particles_in_media = ((x_data >= 0) & (x_data != np.nan) & (x_data < length)).sum()
30.         m0.append(particles_in_media)
31.     return m0
32.
33. def mom(n, position, time, m0, norm=True):
34.     mn = np.zeros(time.shape[0])
35.     for i in range(position.shape[1]):
36.         if m0[i] == 0:
37.             print("no more particles in the media for moment_{1} [m^{1}] @ time = {0} [min]".format(time[i], n))
38.             print("")
39.             mn[i] = 0
40.             # break
41.
42.         else:
43.             mn[i] = np.sum(position[i]**n)
44.     if norm:
45.         return mn/m0
46.     else:
47.         return mn
48.
49. def zero_moment_compute_and_save(seeds, paths, time, files):
50.     for f, file_ in enumerate(files):
51.         m0s = []
52.         for s, seed in enumerate(seeds):
53.             fil = paths[str(seed)][f]
54.             print(file_.split('/')[-1])
55.             par = particles.Particles(fil, dimension=2, time_start=time_start, time_end=time_end, time_step=time_step)
56.             m0 = zero_moment(par.qx)
57.             m0s.append(m0)
58.     df = pd.DataFrame(np.array(m0s).T, columns=[str(s) for s in seeds], index=time)
```

```

59.     df.to_csv(root_dir + moment_data_dir + '/m0' + file_.split('/')[-1])
60.
61.
62. def nth_moment_compute_and_save(nth, seeds, paths, time, files):
63.
64.     # todo: create mnx,mny directories
65.     print('X-DIRECTION')
66.     for f, file_ in enumerate(files):
67.         mnx = []
68.         for s, seed in enumerate(seeds):
69.             fil = paths[str(seed)][f]
70.             print(file_.split('/')[-1])
71.             par = particles.Particles(fil, dimension=2, time_start=time_start, time_end=time_end, time_step=time_step)
72.             x = par.qx[par.qx < length]
73.             m0 = zero_moment(par.qx)
74.             mnx = mom(nth, position=x, time=time, m0=m0, norm=True)
75.             mnx.append(mnx)
76.         df = pd.DataFrame(np.array(mnx).T, columns=[str(s) for s in seeds], index=time)
77.         df.to_csv(root_dir + moment_data_dir + '/m' + str(nth) + 'x' +
78.                 file_.split('/')[-1])
79.     print('Y-DIRECTION')
80.     for f, file_ in enumerate(files):
81.         mny = []
82.         for s, seed in enumerate(seeds):
83.             fil = paths[str(seed)][f]
84.             print(file_.split('/')[-1])
85.             par = particles.Particles(fil, dimension=2, time_start=time_start, time_end=time_end, time_step=time_step)
86.             y = par.qy[par.qx < length]
87.             m0 = zero_moment(par.qx)
88.             mny = mom(nth, position=y, time=time, m0=m0, norm=True)
89.             mny.append(mny)
90.         df = pd.DataFrame(np.array(mny).T, columns=[str(s) for s in seeds], index=time)
91.         df.to_csv(root_dir + moment_data_dir + '/m' + str(nth) + 'y' +
92.                 file_.split('/')[-1])
93.
94.
95. def numpy_moments(nth, seeds, paths, time, files):
96.
97.     # todo: create mnx,mny directories
98.     print('X-DIRECTION')
99.     for f, file_ in enumerate(files):
100.         mnx = []
101.         for s, seed in enumerate(seeds):
102.             fil = paths[str(seed)][f]
103.             print(file_.split('/')[-1])
104.             par = particles.Particles(fil, dimension=2, time_start=time_start, time_end=time_end, time_step=time_step)
105.             x = par.qx[par.qx < length]
106.             m0 = zero_moment(par.qx)
107.             mnx = mom(nth, position=x, time=time, m0=m0, norm=True)
108.             mnx.append(mnx)
109.         df = pd.DataFrame(np.array(mnx).T, columns=[str(s) for s in seeds], index=time)
110.         df.to_csv(root_dir + moment_data_dir + '/m' + str(nth) + 'x' +
111.                 file_.split('/')[-1])
112.     print('Y-DIRECTION')
113.     for f, file_ in enumerate(files):
114.         mny = []
115.         for s, seed in enumerate(seeds):
116.             fil = paths[str(seed)][f]
117.             print(file_.split('/')[-1])
118.             par = particles.Particles(fil, dimension=2, time_start=time_start, time_end=time_end, time_step=time_step)
119.             y = par.qy[par.qx < length]

```

```

120.     m0 = zero_moment(par.qx)
121.     mny = mom(nth, position=y, time=time, m0=m0, norm=True)
122.     mnys.append(mny)
123.     df = pd.DataFrame(np.array(mnys).T, columns=[str(s) for s in seeds], index=time)
124.     df.to_csv(root_dir + moment_data_dir + '/m' + str(nth) + 'y' +
125.               file_.split('/')[-1])
126.
127.
128. if __name__ == '__main__':
129.     root_dir = '/Users/georgepamfilis/Desktop/THESIS/comsol_project/DATA/micromodel/'
130.
131.     # raw_data_dir = root_dir + 'geometry_v8_uniform_source_time_0_2_3500_npar_2000/'
132.     raw_data_dir = root_dir + 'geometry_0.53/'
133.     # moment_data_dir = 'data_v8_uniform_source_time_0_2_3500_npar_2000/'
134.     moment_data_dir = 'data_0.61_1_200/'
135.
136.     length = 200
137.     time_start = 0
138.     time_end = 3500
139.     time_step = 2
140.     print('Creating Directories for the moments')
141.
142.     [os.makedirs(root_dir + moment_data_dir + f, exist_ok=True) for f in ['/m0', '/m1x', '/m1y', '/m2x', '/m2y']]
143.     print('Getting the seeds')
144.     seeds = get_seeds(raw_data_dir)[: ]
145.     print(seeds)
146.     paths = get_data_paths(raw_data_dir, seeds)
147.     print(paths)
148.     time = np.arange(time_start, time_end + time_step, time_step)
149.     files = paths['1']
150.     zero_moment_compute_and_save(seeds, paths, time, files)
151.     nth_moment_compute_and_save(1, seeds, paths, time, files)
152.     nth_moment_compute_and_save(2, seeds, paths, time, files)

```

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Γ: Ρυθμίσεις προγράμματος COMSOL (ροή ρευστού)

Fluid Properties

Active

Override and Contribution

Equation

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)] + \mathbf{F}$$
$$\rho \nabla \cdot (\mathbf{u}) = 0$$

Model Inputs

Fluid Properties

Density:

ρ User defined

ro kg/m³

Dynamic viscosity:

μ User defined

mi Pa-s

Εικόνα 1: ορισμός ιδιοτήτων του ρευστού.

Laminar Flow

Equation form:

Stationary

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)] + \mathbf{F}$$
$$\rho \nabla \cdot (\mathbf{u}) = 0$$

Physical Model

Compressibility:

Incompressible flow

Turbulence model type:

None

Turbulence model:

k-ε

Neglect inertial term (Stokes flow)

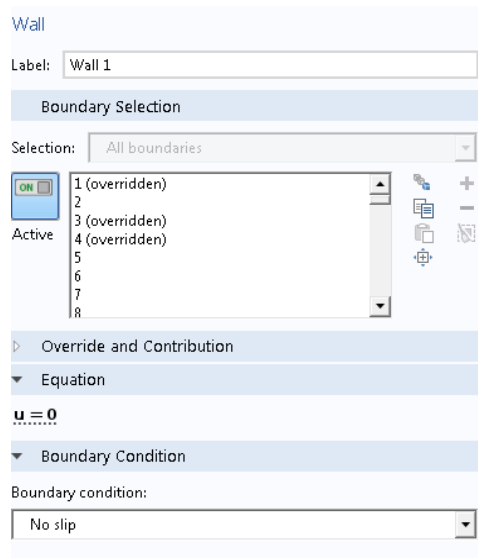
Enable porous media domains

Use shallow channel approximation

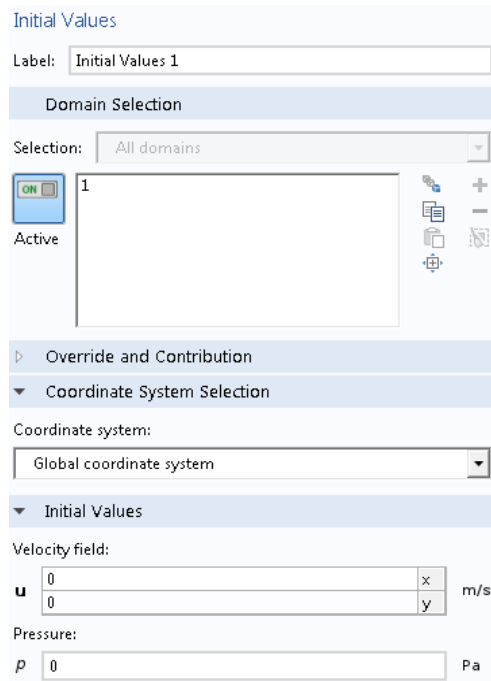
Reference pressure level:

Pref 1[atm] Pa

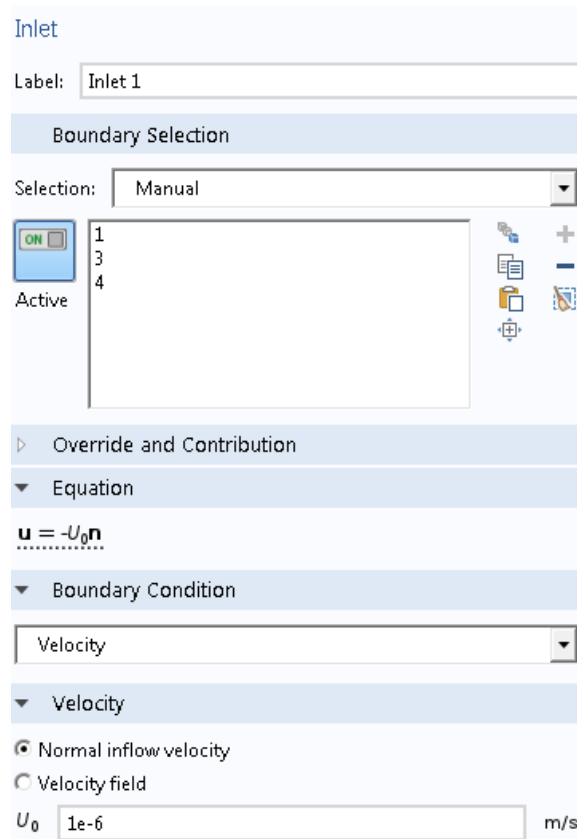
Εικόνα 2: ορισμός ιδιοτήτων της ροής.



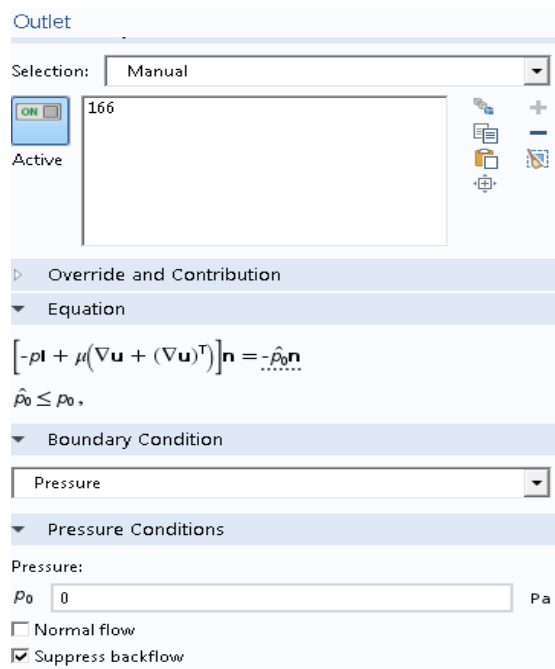
Εικόνα 3: Ορισμός ιδιοτήτων της επιφάνειας του πορώδους.



Εικόνα 4: Αρχικές τιμές του ρευστού.

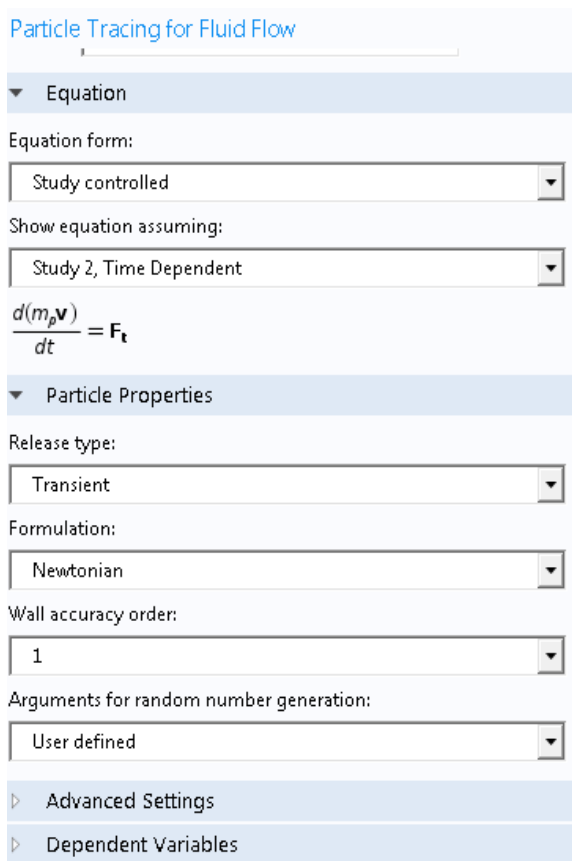


Εικόνα 5: Ορισμός εισόδου του ρευστού στο μέσο.

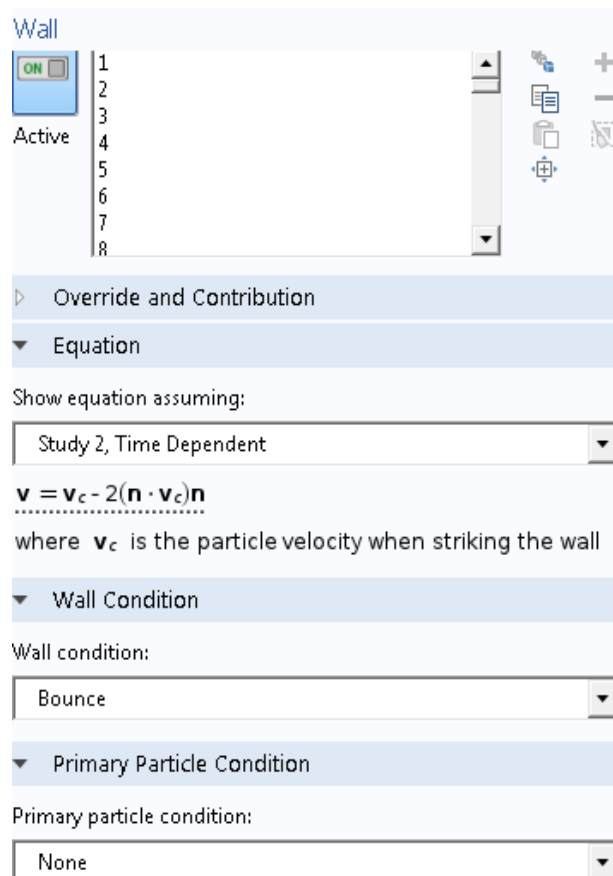


Εικόνα 6: Ορισμός της εξόδου του ρευστού από το μέσο.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Δ: Ρυθμίσεις προγράμματος COMSOL (μεταφορά σωματιδίων)



Εικόνα 8: Ορισμός επιλυτή και είδος μοντέλου για τη μεταφορά των σωματιδίων.



Εικόνα 7: Ορισμός τύπου αλληλεπίδρασης των σωματιδίων με τα τοιχώματα των πόρων.

Particle Properties

Label:

Equation

Show equation assuming:

$$\frac{d(m_p \mathbf{v})}{dt} = \mathbf{F}_t$$

Particle Properties

Particle property specification:

Particle density:
 ρ_p kg/m³

Particle diameter:
 d_p m

Charge Number

Charge number:
 Z 1

Drag Force

Show equation assuming:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{\tau_p} m_p (\mathbf{u} - \mathbf{v})$$

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu}$$

Model Inputs

Drag Force

Turbulent dispersion

Drag law:

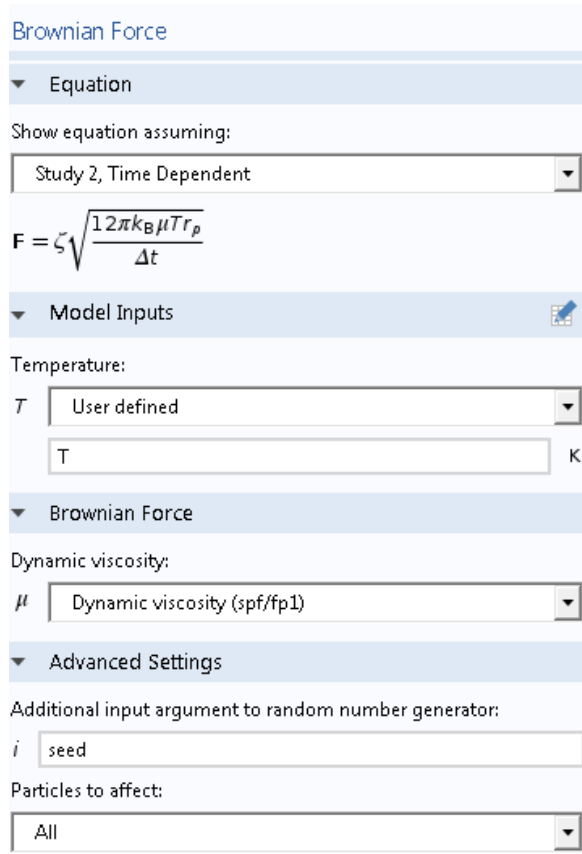
Velocity field:
 \mathbf{u}

Dynamic viscosity:
 μ

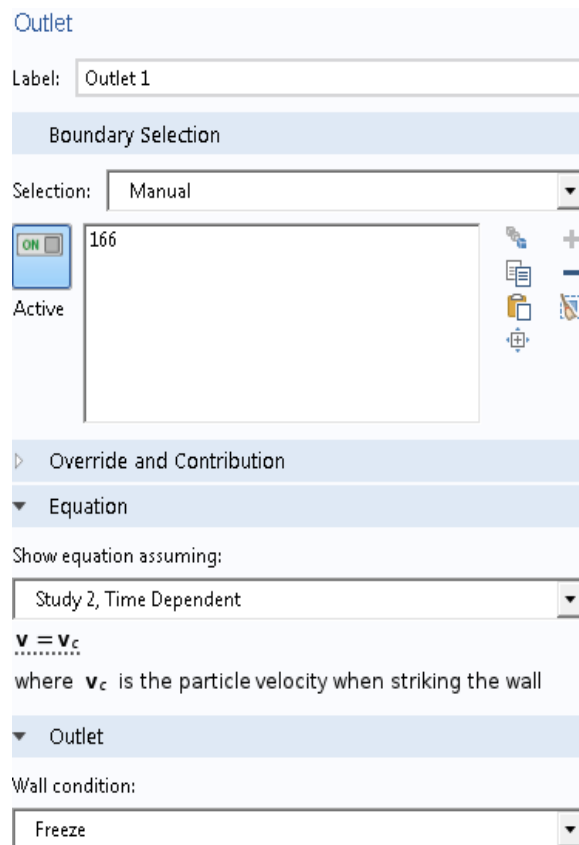
Advanced Settings

Particles to affect:

Εικόνα 10: Ορισμός ιδιοτήτων των κολλοειδών. Εικόνα 9: Ορισμός παραμέτρων οπισθέλκουσας δύναμης.



Εικόνα 12: Ορισμός παραμέτρων δύναμης Brown στα σωματίδια καθώς και του τυχαίου σπόρου.



Εικόνα 11: Ορισμός συνθηκών της εξόδου του πορώδους όσον αφορά τα σωματίδια.

Inlet

Equation

Show equation assuming:

Study 2, Time Dependent

$\mathbf{q} = \mathbf{q}_0$

$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0$

Release Times

Release times:

0 s

Initial Position

Initial position:

Uniform distribution

Number of particles per release:

N 2000

Initial Velocity

Initial velocity:

Expression

Velocity field:

\mathbf{u} Velocity field (spf)

Εικόνα 13: Ορισμός συνθηκών εισόδου των σωματιδίων στο πορώδες μέσο.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ε: Κώδικας επίλυσης δεύτερου νόμου του Fick (παράδειγμα)

```
1. #https://scipython.com/book/chapter-7-matplotlib/examples/the-two-dimensional-diffusion-equation/
2. import numpy as np
3. import matplotlib.pyplot as plt
4.
5. # plate size, mm
6. w = h = 10.
7. # intervals in x-, y- directions, mm
8. dx = dy = 0.1
9. #
10. D = 4.
11.
12. Tcool, Thot = 300, 700
13.
14. nx, ny = int(w / dx), int(h / dy)
15.
16. dx2, dy2 = dx * dx, dy * dy
17. dt = dx2 * dy2 / (2 * D * (dx2 + dy2))
18.
19. u0 = Tcool * np.ones((nx, ny))
20. u = np.empty((nx, ny))
21.
22. # Initial conditions - ring of inner radius r, width dr centred at (cx,cy) (mm)
23. r, cx, cy = 2, 5, 5
24. r2 = r ** 2
25. for i in range(nx):
26.     for j in range(ny):
27.         p2 = (i * dx - cx) ** 2 + (j * dy - cy) ** 2
28.         if p2 < r2:
29.             u0[i, j] = Thot
30.
31.
32. def do_timestep(u0, u):
33.     # Propagate with forward-difference in time, central-difference in space
34.     u[1:-1, 1:-1] = u0[1:-1, 1:-1] + D * dt * (
35.         (u0[2:, 1:-1] - 2 * u0[1:-1, 1:-1] + u0[:-2, 1:-1]) / dx2
36.         + (u0[1:-1, 2:] - 2 * u0[1:-1, 1:-1] + u0[1:-1, :-2]) / dy2)
37.
38.     u0 = u.copy()
39.     return u0, u
40.
41.
42. # Number of timesteps
43. # if __name__ == '__main__':
44. print('Running')
45. nsteps = 200
46. # Output 4 figures at these timesteps
47. mfig = [0, 10, 50, 100]
48. fignum = 0
49. fig = plt.figure()
50. for m in range(nsteps):
51.     u0, u = do_timestep(u0, u)
52.     if m in mfig:
53.         fignum += 1
54.         print(m, fignum)
55.         ax = fig.add_subplot(220 + fignum)
56.         im = ax.imshow(u.copy(), cmap=plt.get_cmap('hot'), vmin=Tcool, vmax=Thot)
57.         ax.set_axis_off()
58.         ax.set_title('{:1f} ms'.format(m * dt * 1000))
```

```
59. fig.subplots_adjust(right=0.85)
60. cbar_ax = fig.add_axes([0.9, 0.15, 0.03, 0.7])
61. cbar_ax.set_xlabel('$C$ / $[M/L^3]$', labelpad=20)
62. fig.colorbar(im, cax=cbar_ax)
63. plt.show()
```