



CHALMERS TEKNISKA HÖGSKOLA
Institutionen för vattenbyggnad

**NUMERISK MODELL AV VATTENOMSÄTTNINGS-
MEKANISMER**

av

Lennart Holm

Examensarbete 1973:9

Göteborg

Rättelselista för examensarbetet: "NUMERISK MODELL AV VATTEN-
OMSÄTTNINGSMEKANISMER", av Lennart Holm, 1973:9 CTH.

Innehållsförteckningens sista sid-hänvisningar: "50, 72, 74, 77"
skall vara 48, 67, 69, 72 resp.

Sidan 5, rad 19 skall sluta: ... koordinatriktning och ϱ är

- " 5, fig. 2.2.1 står: " $p + \frac{\partial p}{\partial x}$ ", skall vara $p + \frac{\partial p}{\partial x} dx$.
- " 5, fig. 2.2.1, högra pilen skall vändas.
- " 6, parentesuttrycken i ekv. (2.2.1), (2.2.2) och (2.2.3),
skall vara $(p + \frac{\partial p}{\partial x} dx)$, $(p + \frac{\partial p}{\partial y} dy)$ och $(p + \frac{\partial p}{\partial z} dz)$.
- " 6, fig. 2.3.1, står: " $\varrho u + \frac{\partial(\varrho u)}{\partial x}$ ", skall vara $\varrho u + \frac{\partial(\varrho u)}{\partial x} dx$.
- " 7, ekv. (2.3.2) skall vara $\frac{\partial(\varrho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\varrho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\varrho w)}{\partial z} = \frac{\partial \varrho}{\partial t}$
- " 9, fig. 2.4.1, står: " $\tau_x + \frac{\partial \tau_x}{\partial z}$ ", " $\tau_x + \frac{\partial \tau_x}{\partial x}$ ", skall vara
 $\tau_x + \frac{\partial \tau_x}{\partial z} dz$ resp. $\tau_x + \frac{\partial \tau_x}{\partial x} dx$.
- " 11, tecknet för den sista termen i VL, ekv. (2.4.22) samt
för de två sista termerna i VL, ekv. (2.4.23) skall
vara negativt.
- " 13, ekv. (3.3.1), 3:e termen i integranden skall vara
 $\frac{\partial(u)}{\partial y} v$, tecknet för integrandtermen $\frac{\partial \tau}{\partial z}$ i ekv. (3.3.1)
och (3.3.2) skall vara negativt.
Det sista uttrycket p.s.sid. skall vara
$$\int_{-B}^Y \frac{\partial \tau}{\partial z} dz = \tau(Y) - \tau(-B)$$
- " 14, Uttrycket $\tau(B)$ skall överallt ersättas med $\tau(-B)$.
På rad 8 står "delintegraleran", skall vara delinte-
gralen. Tecknet före $\frac{1}{\rho} (\tau(Y) - \tau(-B))$ i ekv.
(3.3.4) och (3.3.5) skall vara negativt.
- " 15, På rad 4 nerifrån står: " en en", skall vara: i en
- " 16, På rad 6 står: "balnsekvation för assflödet", skall
vara: balansekvation för massflödet,
- " 18, Integranden i HL, ekv. (4.2.8) skall vara: $E \frac{\partial c'}{\partial y} dz$
Och integralen i VL skall vara negativ för samma ekv.

Sidan 27, På rad 12 står: "snitt x=A", skall vara: snitt x=X.

" 28, På rad 16 står: " Antag ex vid", skall vara: Antag
ex. vis

" 31, I matriserna C och D står indicier: "j-2","j-1",etc
skall vara: J-2, J-1, etc.

" 34, ekv. (6.3.2) bör förtydligas till

$$\left[AE \frac{\partial c}{\partial x} \right]_{x = \frac{\Delta x}{2}} = \left[A c u \right]_{x = \frac{\Delta x}{2}} - \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} R dx + \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} A \frac{c}{t} dx$$

" 36, På rad 7 nerifrån står: "varabla", skall vara: variab-
la

" 37, Raden: "Implicita lösningsmetoder ..." bör strykas.

" 41, På rad 12 står: "spårämnesförsök 11 och modellen",
skall vara: ...spårämnesförsök 11 . Modellen ...

" 49, På rad 21 står: "...sid 52.", skall vara: ...sid. 42.



CHALMERS TEKNISKA HÖGSKOLA
Institutionen för vattenbyggnad

Examensarbete 1973:9

NUMERISK MODELL AV VATTENOMSÄTTNINGS-
MEKANISMER

av

Lennart Holm

FÖRORD

Föreliggande arbete presenterar och i de flesta fall härleder de ekvationer som styr vattenomsättningen i olika typer av vattensystem. Vidare diskuteras olika spridningsförlopp av föroreningar. Problematiken med molekylär-, och turbulent diffusion samt dispersion, diskuteras i kap 5. Diffusions- advektionsekvationen presenteras och ges en enkel härledning. Diffusions- advektionsekvationen tillämpas på ett simulerat avloppsutsläpp i Byfjordens ytvatten. Två dataprogram presenteras varav ett för numerisk lösning av diffusions- advektionsekvationen och ett för beräkning av diffusionskoefficienter.

Handledare för examensarbetet har varit civ. ing. Torbjörn Svensson som välvilligt bistått med goda råd och varit en källa till givande diskussioner.

At 6 p. m. the well marked $\frac{1}{2}$ inch of water,
at nightfall $\frac{3}{4}$ and at daybreak $\frac{7}{8}$ of an inch.
By noon of the next day there was $\frac{15}{16}$ and on
the next night $\frac{31}{32}$ of an inch of water in the
hold. The situation was desperate.
At this rate of increase few, if any,
could tell where it would rise to
in a few days.

STEPHEN LEACOCK.

INNEHÅLLSFÖRTECKNING

MÅLSÄTTNING	1
BETECKNINGAR	2
1. INLEDNING	3
2. ALLMÄNNA HYDRODYNAMISKA SAMBAND	5
2.1 Allmänt	5
2.2 Jämviktsekvationen	5
2.3 Kontinuitetsekvationen	6
2.4 Rörelsekvationen	7
3. ÖVERFÖRING AV DE GENERELLA KONTINUITETS- OCH RÖRELSEEKVATIONERNA TILL EN TVÅ-DIMENSIONELL MODELL	11
3.1 Allmänt	11
3.2 Definitioner	12
3.3 Integration över djupet av kontinuitets- och rörelsekvationerna.	13
4. MASSTRANSPORT AV EN SUBSTANS I ETT VATTEN-SYSTEM	15
4.1 Allmänt	15
4.2 Diffusions- advektionsekvationen i tre dimensioner	16
4.3 " " " två "	17
4.4 " " " en dimension	20
5. DIFFUSIONSMEKANISMEN	22
5.1 Allmänt	22

5.2	Teoretisk beräkning av diffusionskoefficienter	24
5.3	Beräkning av diffusionskoefficienter med hjälp av spårämnesförsök.	26
6.	NUMERISK LÖSNING AV DIFFUSIONS- ADVEKTIONSEKVATIONEN	28
6.1	Allmänt	28
6.2	Endimensionell modell	29
6.3	Inre randvillkor	33
6.4	Yttre randvillkor	35
7.	EGENHETER HOS BERÄKNINGSMODELLER	36
7.1	Effekter av finita differensapproximationer	36
7.2	Stabilitet	37
8.	TILLÄMPNING AV DEN EN-DIMENSIONELLA DIFFUSIONS- ADVEKTIONSMODELLEN PÅ ÖMSÄTTNINGEN AV YTVATTNET I BYFJORDEN	40
8.1	Allmänt	40
8.2	Diffusionskoefficienter	41
8.3	Koncentrationsberäkning för ett simulerat avloppsutsläpp	50
8.4	Sammanfattning av beräkningsresultaten	72
	REFERENSER	74
	APPENDIX MED DATAPROGRAM	77

MÅLSÄTTNING

Förslag till examensarbete vid Inst. f. vattenbyggnad 1973

Numerisk modell av vattenomsättningsmekanismer.

Vid vattenomsättningsstudier i Byfjorden har mätning av bl a temperatur- och salthaltsfördelningen och dess förändring i tiden utförts. Vidare har experiment med spårämne, Rodamin B, utförts i såväl yt- som botten- vattnet. Spridning och transport av dessa ämnen bestäms av strömmar och diffusion och av fjordens geometri. För analys av erhållna mätvärden kan en matematisk modell för endimensionell diffusion - advektion användas. På grund av att strömmar, diffusionskoefficient och topografi varierar måste ekvationerna emellertid lösas numeriskt, lämpligen på dator. Analysen utföres så att spridningen av ett aktuellt ämne simuleras genom numerisk lösning av den aktuella differentialekvationen med relevanta start- och randvillkor. Koefficienterna i modellen varierar tills beräknad koncentrationsutveckling fås att överensstämma med den uppmätta.

Samma modell kan användas dels för att beräkna vertikal diffusionshastighet utgående från salthalts- temperatur- eller rodaminmätningar och dels för analys av horisontell diffusion utgående från rodaminmätningar i fjordens ytskikt.

Som ett sista steg kan koncentrationsutveckling vid olika typer av föroreningsutsläpp i fjorden beräknas.

Examensarbetet påbörjas med ett studium av litteraturen, där speciellt olika numeriska metoder för lösning av diffusions-, advektionsekvationen finns redovisade. Färdiga dataprogram finns även redovisade, vilka anpassas till det aktuella problemet. Maskintid för datakörning finns tillgänglig på Göteborgs Datacentral och som programspråk väljes troligen Fortran. Arbetet förutsättes utföras i intimt samarbete med handledaren.

Beteckningar

A	=	Area
B	=	Djup till botten från referensplanet
C	=	Koncentration
C	=	Chezys koefficient
D	=	Dispersionskoefficient
E	=	Diffusionskoefficient
f	=	Coriolis parameter
g	=	Jordaccelerationen
H	=	Totalt vattendjup
L	=	Längd
M	=	Mannings tal
P	=	Kraft
p	=	Tryck
q	=	Källterm
R	=	"
ρ	=	Täthet
σ	=	Normalspänning
τ	=	Skjuvspänning
t	=	Tid
u	=	Hastighet i x-riktning
v	=	" i y- "
w	=	" i z- "
X	=	Tröghetskraft i x-riktning
Y	=	" i y- "
Y	=	Vattennivå över referensplanet
Z	=	Tröghetskraft i z-riktningen

1. INLEDNING

Biologer, limnologer, oceanografer och tekniker har goda möjligheter att beskriva, beräkna och förutsäga utveckling och förlopp av en förorening i ett aquatiskt system under givna, förenklade förutsättningar och betingelser. Däremot tycks möjligheterna vara begränsade att matematiskt-numeriskt beräkna spridningsförlopp i dynamiska system under mera generella förhållanden.

Studiet av tekniska lösningar att förutsäga koncentrationsutveckling av en förorening inkluderar många svårbedömbara faktorer som påverkar föroreningsbelastningen i ett vattensystem, såsom lokalisering av utsläpp, graden av förbehandling av avloppsvatten, vattenområdets geometri, flöden och strömmar, temperatur och vindar, solinstrålning etc. Att göra en korrekt bedömning av varje enskild faktors inverkan på föroreningsgraden kräver erfarenhet och kunnande inom respektive område. Det är följdaktligen än svårare att analysera ett system när alla faktorer samverkar och påverkar varandra.

Det givna problemet är ofta alldeles för komplicerat för att fullständigt kunna beskrivas med matematisk terminologi. Man får därför ofta nöja sig med en idealisering av verkligheten i form av en förenklad matematisk modell. För bearbetning av modellen krävs sedan ofta numeriska beräkningsprocedurer, som kan programmeras för en dator som sedan eventuellt matar ut en användbar lösning.

Vägen från en problemställning till en lösning kan åskådliggöras enl. fig. 1.

Vattnet är ett farligt gift
som omger Visby stift.

FALSTAFF FAKIR

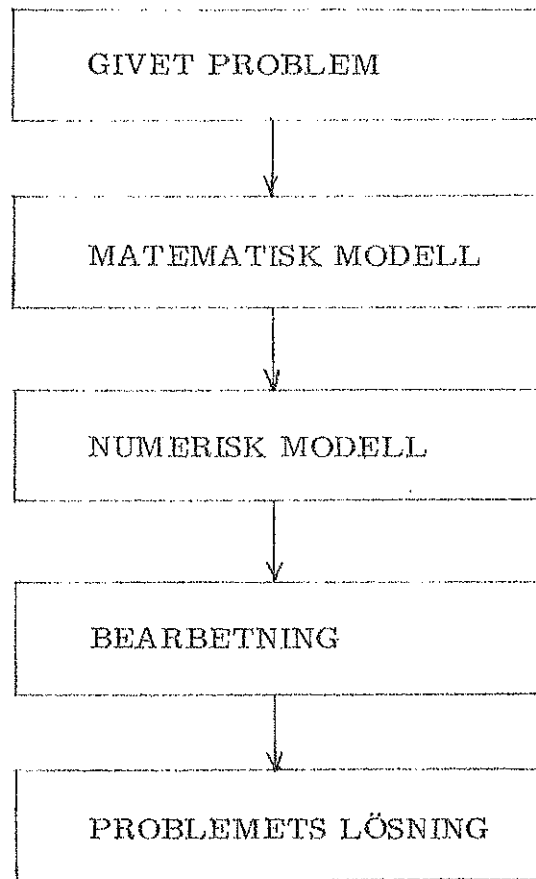


Fig. 1 Beräkningsschema.

2. ALLMÄNNA HYDRODYNAMISKA SAMBAND

2.1 Allmänt

Jämviktsekvationen, kontinuitetsekvationen och rörelseekvationen är tre fundamentala samband som helt eller delvis ligger till grund för hydrostatiska eller hydrodynamiska problemställningar. För att skapa numeriska modeller av vattenomsättningsmekanismer kan det vara lämpligt att analytiskt härleda erforderliga ekvationer i infinita former. Genom att sedan approximera de i ekvationerna ingående derivatorna med finita differenser erhåller man uttryck som kan bearbetas i datorer eller i enkla fall i numeriska bordskalkylatorer. Här under kap 2 skall kortfattat härledas de tre ekvationerna jämvikts-, kontinuitets- och rörelseekvationen i allmän form, se vidare [3].

2.2 Jämviktsekvationen

Orientera en enhetsvolym $dv = dx \cdot dy \cdot dz$ utefter koordinataxlarna i ett ortogonalt koordinatsystem enl fig. 2.2.1

Om elementet förutsätts vara i jämvikt, påverkas det endast av yt- och masskrafter. Ytkrafterna utgörs av hydrostatiskt tryck medan masskrafterna härrör från tröghetskrafter. Tryckkrafterna betecknas med p och masskrafterna med X , Y , Z i respektive koordinatriktning och ρ är vätskans täthet.

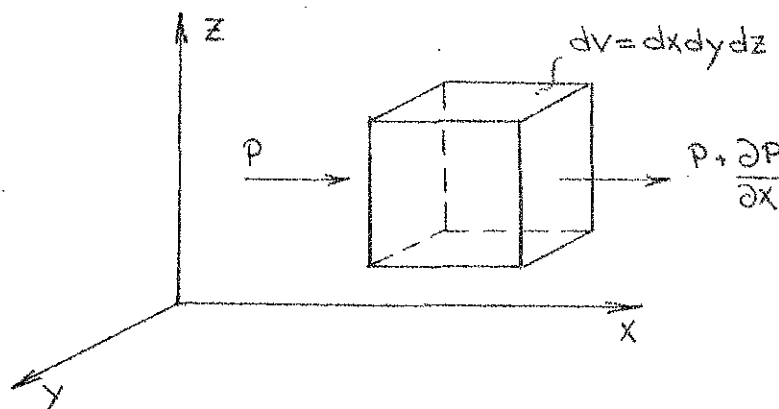


Fig. 2.2.1

Jämviktsekvationer i x-, y- och z-led ger

$$\left(\overset{x}{\rightarrow}\right); \quad p \cdot dy \cdot dz + \varrho \cdot X dx \cdot dy \cdot dz - \left(p + \frac{\partial p}{\partial x}\right) dy \cdot dz = 0. \quad (2.2.1)$$

$$\left(\overset{y}{\rightarrow}\right); \quad p \cdot dx \cdot dz + \varrho \cdot Y dx \cdot dy \cdot dz - \left(p + \frac{\partial p}{\partial y}\right) dx \cdot dz = 0. \quad (2.2.2)$$

$$\left(z \uparrow\right); \quad p \cdot dx \cdot dy + \varrho \cdot Z dx \cdot dy \cdot dz - \left(p + \frac{\partial p}{\partial z}\right) dx \cdot dy = 0. \quad (2.2.3)$$

Förkortas ekvation (2.2.1) med $dy \cdot dz$, ekvation (2.2.2) med $dx \cdot dz$ och ekvation (2.2.3) med $dx \cdot dy$ och summeras de så bildade ekvationerna erhålles jämviktsekvationen för vätskor

$$\varrho (X dx + Y dy + Z dz) = \frac{\partial p}{\partial x} dx + \frac{\partial p}{\partial y} dy + \frac{\partial p}{\partial z} dz \quad (2.2.4)$$

2.3 Kontinuitetsekvationen [3]

Enhetsvolymen $dy = dx \cdot dy \cdot dz$ studeras, och denna är som tidigare orienterad utefter koordinataxlarna x, y, z . Hastighetskomponenterna i resp riktning betecknas u, v, w fjr fig 2.3.1

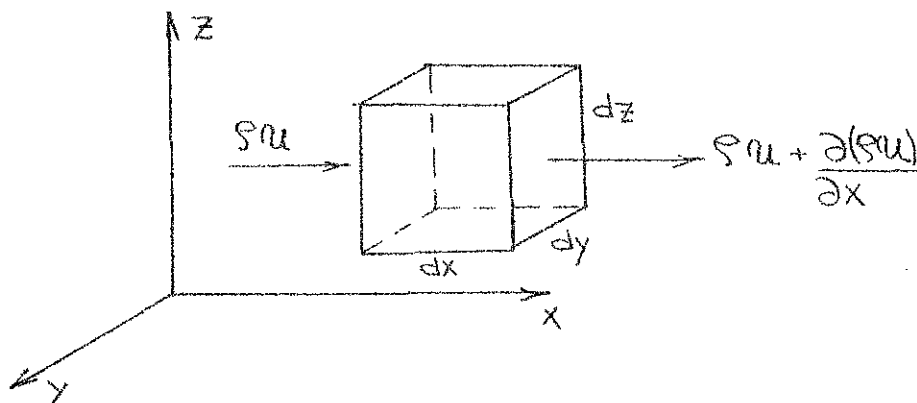


FIG. 2.3.1

Nu gäller att skillnaden mellan den massa som strömmar in och den som strömmar ut ur enhetsvolymen dV i respektive koordinatriktning måste

utgöra ändringen av massinnehåll i volymen dV per tidsenhet.

$$\begin{aligned} & \varrho u \cdot dy \, dz + \varrho v \cdot dx \cdot dz + \varrho w \, dx \, dy - \left[\varrho u + \frac{\partial}{\partial x} (\varrho u) \, dx \right] dy \, dz - \\ & - \left[\varrho v + \frac{\partial}{\partial y} (\varrho v) \, dy \right] dx \cdot dz - \left[\varrho w + \frac{\partial}{\partial z} (\varrho w) \, dz \right] dx \, dy = \\ & = \frac{\partial \varrho}{\partial t} \, dx \, dy \, dz \end{aligned} \quad (2.3.1)$$

Borttages parenteserna i ekvation (2.3.1) och förkortas båda leden med $dV = dx \cdot dy \cdot dz$ erhåller man kontinuitetsekvationen för vätskor, ekv. (2.3.2)

$$\frac{\partial (\varrho u)}{\partial x} + \frac{\partial (\varrho v)}{\partial y} + \frac{\partial (\varrho w)}{\partial z} = - \frac{\partial \varrho}{\partial t} \quad (2.3.2)$$

2.4 Rörelseekvationen [3], [10]

Flödet i en vätska är i allmänhet 3-dimensionellt och tidsberoende vilket medför att det är en funktion av fyra parametrar; lägeskoordinaterna x , y och z samt tiden t .

Symboliskt kan detta skrivas som

$$u = f_1(x, y, z, t) \quad (2.4.1)$$

$$v = f_2(x, y, z, t) \quad (2.4.2)$$

$$w = f_3(x, y, z, t) \quad (2.4.3)$$

Differentieras ϱu , ϱv och ϱw med avseende på parametrarna x , y , z och t erhålles följande ekvationer

$$d(\varrho u) = \frac{\partial(\varrho u)}{\partial t} dt + \frac{\partial(\varrho u)}{\partial x} dx + \frac{\partial(\varrho u)}{\partial y} dy + \frac{\partial(\varrho u)}{\partial z} dz \quad (2.4.4)$$

$$d(\varrho v) = \frac{\partial(\varrho v)}{\partial t} dt + \frac{\partial(\varrho v)}{\partial x} dx + \frac{\partial(\varrho v)}{\partial y} dy + \frac{\partial(\varrho v)}{\partial z} dz \quad (2.4.5)$$

$$d(\varrho w) = \frac{\partial(\varrho w)}{\partial t} dt + \frac{\partial(\varrho w)}{\partial x} dx + \frac{\partial(\varrho w)}{\partial y} dy + \frac{\partial(\varrho w)}{\partial z} dz \quad (2.4.6)$$

Om nu tätheten antas vara oberoende av tiden gäller att

$$\frac{d(\xi u)}{dt} = \xi \frac{du}{dt}, \quad \frac{d(\xi v)}{dt} = \xi \frac{dv}{dt}, \quad \frac{d(\xi w)}{dt} = \xi \frac{dw}{dt}$$

Helt allmänt gäller dessutom att

$$dx = u \cdot dt, \quad dy = v \cdot dt, \quad dz = w \cdot dt$$

Förkortas ekvationerna (2.4.4), (2.4.5) och (2.4.6) med dt varefter ovanstående 6 relationer kan substitueras i samma ekvationer varvid dessa övergår i

$$\xi \frac{du}{dt} = \frac{\partial(\xi u)}{\partial t} + u \frac{\partial(\xi u)}{\partial x} + v \frac{\partial(\xi u)}{\partial y} + w \frac{\partial(\xi u)}{\partial z} \quad (2.4.7)$$

$$\xi \frac{dv}{dt} = \frac{\partial(\xi v)}{\partial t} + u \frac{\partial(\xi v)}{\partial x} + v \frac{\partial(\xi v)}{\partial y} + w \frac{\partial(\xi v)}{\partial z} \quad (2.4.8)$$

$$\xi \frac{dw}{dt} = \frac{\partial(\xi w)}{\partial t} + u \frac{\partial(\xi w)}{\partial x} + v \frac{\partial(\xi w)}{\partial y} + w \frac{\partial(\xi w)}{\partial z} \quad (2.4.9)$$

Newtons' kraftlag tillämpas nu i respektive koordinatriktning på ett vätskeelement med massan $m = \xi \cdot dx \cdot dy \cdot dz$

$$\begin{matrix} x \\ (\rightarrow) \end{matrix} \quad P_x = m \frac{du}{dt} \quad (2.4.10)$$

$$\begin{matrix} y \\ (\rightarrow) \end{matrix} \quad P_y = m \frac{dv}{dt} \quad (2.4.11)$$

$$\begin{matrix} z \\ (\rightarrow) \end{matrix} \quad P_z = m \frac{dw}{dt} \quad (2.4.12)$$

För ett vätskeelement i rörelse gäller allmänt ekvationerna (2.4.10), (2.4.11) och (2.4.12). Krafterna P_x , P_y och P_z kan bestämmas med en analys av vilka yt- och masskrafter som uppträder för ett vätskeelement i ett dynamiskt system.

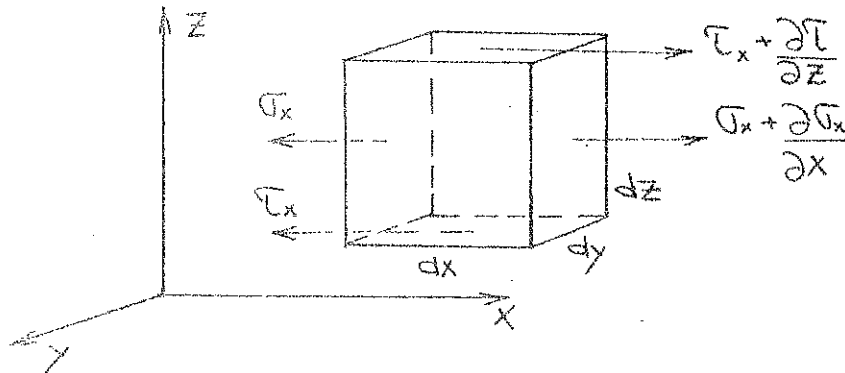


FIG. 2.4.1

I fig 2.4.1 har angivits de yt- och masskrafter som verkar på en enhetsvolym $dV = dx \cdot dy \cdot dz = 1 \cdot 1 \cdot 1 = 1$ i x-koordinatens riktning. Ytkrafterna består av normal- och skjuvspänningar. Masskraften X som angriper i elementets masscentrum utgöres av Corioliskraften, som på norra halvklotet verkar åt höger när man rör sig i horisontalplanet. $X = -f \cdot \zeta \cdot dV \cdot v$ där v är hastighetskomponenten utefter y-axeln, och f är en parameter knuten till Corioliskraften.

Genom att på motsvarande sätt analysera enhetselementet dV med avseende på resulterande krafter i resp koordinatriktning erhålles

$$P_x = -f \cdot \zeta \cdot dV \cdot v + \frac{\partial \sigma}{\partial x} dx (dy \cdot dz) + \frac{\partial \tau}{\partial z} xz dz (dx \cdot dy) + \frac{\partial \tau}{\partial y} xy dy (dx \cdot dz) \quad (2.4.13)$$

$$P_y = f \cdot \zeta \cdot dV \cdot u + \frac{\partial \sigma}{\partial y} dy (dx \cdot dz) + \frac{\partial \tau}{\partial z} yz dz (dx \cdot dy) + \frac{\partial \tau}{\partial x} yx dx (dy \cdot dz) \quad (2.4.14)$$

$$P_z = -g \cdot \zeta \cdot dV + \frac{\partial \sigma}{\partial z} dz (dx \cdot dy) \quad (2.4.15)$$

Den första termen i högra ledet i ekvation (2.4.13), (2.4.14) är bidrag från Corioliskraften, den andra termen är bidrag från normalkrafter som verkar på elementet i respektive koordinatriktning och den tredje och den fjärde termen är skjuvkrafter, varvid man i en homogen vattenmassa kan anta att resulterande skjuvkrafter endast finns i horisontalplanet varför den sista termen kan försummas.

I ekvation (2.4.15) utgör den första termen i högra ledet inverkan av gravitationskraften och den andra termen normalkraften i vertikalled. Bidraget från skjuvkrafter i vertikalplanet har här försummats då de vertikala hastighetskomponenterna antas vara små i förhållande till de horisontella.

Enligt [3] kan normalspänningarna på ett vätskeelement i rörelse skrivas som

$$\sigma_x = -p + 2\eta \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2\eta}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \quad (2.4.16)$$

$$\sigma_y = -p + 2\eta \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{2\eta}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \quad (2.4.17)$$

$$\sigma_z = -p + 2\eta \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2\eta}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \quad (2.4.18)$$

För en vätska i vila gäller att

$$\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = -p$$

Flödet i en vattenmassa är som tidigare nämnts, tre-dimensionellt och tidsberoende. I en naturlig vattenmassa sker i allmänhet det dominerande flödet i horisontalplanet. Trycket är hydrostatiskt skjuvspänningarna från de vertikala hastighetskomponenterna är små varför de i fortsättningen försummas.

Multiplieras båda leden i ekvationerna (2.4.7), (2.4.8) och (2.4.9) med enhetsvolymen $dV = dx \cdot dy \cdot dz$ och substitueras dessa ekvationer sedan i ekvationerna (2.4.10), (2.4.11) och (2.4.12) övergår dessa i

$$P_x = \left[\frac{\partial(\xi u)}{\partial t} + \frac{\partial(\xi u)}{\partial x} \cdot u + \frac{\partial(\xi u)}{\partial y} \cdot v + \frac{\partial(\xi u)}{\partial z} \cdot w \right] dx \cdot dy \cdot dz \quad (2.4.19)$$

$$P_y = \left[\frac{\partial(\xi v)}{\partial t} + \frac{\partial(\xi v)}{\partial x} \cdot u + \frac{\partial(\xi v)}{\partial y} \cdot v + \frac{\partial(\xi v)}{\partial z} \cdot w \right] dx \cdot dy \cdot dz \quad (2.4.20)$$

$$P_z = \left[\frac{\partial(\xi w)}{\partial t} + \frac{\partial(\xi w)}{\partial x} \cdot u + \frac{\partial(\xi w)}{\partial y} \cdot v + \frac{\partial(\xi w)}{\partial z} \cdot w \right] dx \cdot dy \cdot dz \quad (2.4.21)$$

Uttrycken för normalspänningarna enl ekv (2.4.16), (2.4.17) och (2.4.18) substitueras i ekv (2.4.13), (2.4.14) och (2.4.15).

Kombineras sedan ekv. (2.4.19), (2.4.20) och (2.4.21) med ekv (2.4.13) (2.4.14) och (2.4.15) får man efter förkortning med $dx \cdot dy \cdot dz = dV$

$$\frac{\partial(\xi u)}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial(\xi u)}{\partial x} + v \cdot \frac{\partial(\xi u)}{\partial y} + w \cdot \frac{\partial(\xi u)}{\partial z} + f \cdot \xi \cdot v + \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \bar{\xi}_x}{\partial z} = 0 \quad (2.4.22)$$

$$\frac{\partial(\xi v)}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial(\xi v)}{\partial x} + v \cdot \frac{\partial(\xi v)}{\partial y} + w \cdot \frac{\partial(\xi v)}{\partial z} = f \cdot \xi \cdot u + \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \bar{\xi}_y}{\partial z} = 0 \quad (2.4.23)$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} + \xi g = 0 \quad (2.4.24)$$

I ekvationerna (2.4.22), (2.4.23) och (2.4.24) har högre derivator av hastighetskomponenterna uteslutits och deras tillskott tillåtits ingå i den horisontella skjuvspänningen. Tidigare har påpekats att i naturliga vattensystem hastighetskomponenten i z-led oftast är av mindre storleksordning än hastighetskomponenterna i horisontalled varför produkten $\xi \cdot w$ i ekv (2.4.21) kan betraktas som konstant utan att man därigenom inför något större fel i ekv. (2.4.24)

3. ÖVERFÖRING AV DE GENERELLA KONTINUITETS- OCH FLÖDESEKVATIONERNA TILL EN TVÅDIMENSIONELL MODEL

3.1 Allmänt

Enligt [10] är det för närvarande knappast möjligt att med numeriska metoder och med hjälp av datateknik lösa tre-dimensionella flödesproblem och med

de komplicerade randvillkor som föreligger i naturliga vattensystem. Det är därför nödvändigt att reducera det generella tre-dimensionella fallet till ett två-dimensionellt.

Ett sätt att åstadkomma detta är att integrera flödesekvationerna (2.4.22) och (2.4.23) samt kontinuitetsekvationen (2.3.2) över djupet z .

Randvillkoren för den vertikala hastigheten w vid vattenytan och vid botten kan enl [10] ansättas till

$$w(Y) = u(Y) \frac{\partial Y}{\partial x} + v(Y) \frac{\partial Y}{\partial y} + \frac{\partial Y}{\partial t} \quad (3.1.1)$$

$$w(-B) = 0 \quad (3.2.2)$$

Y är vattenytans nivå relativt ett horisontellt referensplan i vattensystemet.

B är avståndet från nämnda referensplan till botten.

Det totala vattendjupet $H = Y + B$.

Om tätheten antas vara konstant över djupet och dessutom är oberoende av tiden förenklas flödesekvationerna och kontinuitetsekvationen genom att ϱ kan flyttas ut ur derivatorna, som ingår i det nämnda ekvationerna.

3.2 Definitioner

$$u = \bar{u} + u' \quad (3.2.1)$$

$$v = \bar{v} + v' \quad (3.2.2)$$

$$c = \bar{c} + c' \quad (3.2.3)$$

$$\bar{u} = \frac{1}{H} \int u(z) dz \quad (3.2.4)$$

$$\bar{v} = \frac{1}{H} \int v(z) dz \quad (3.2.5)$$

$$\int u'(z) dz = 0 \quad (3.2.6)$$

$$\int v'(z) dz = 0 \quad (3.2.7)$$

$$\int c'(z) dz = 0 \quad (3.2.8)$$

3.3 Integrering över djupet av kontinuitets- och flödesekvationerna

Med tillämpning av definitionerna under 3.2 integreras flödesekvationerna (2.4.22) och (2.4.23) samt kontinuitetsekvationen (2.3.2) vertikalt över djupet.

$$\int \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(u)}{\partial x} \cdot u + \frac{\partial(w)}{\partial y} \cdot v + \left(\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau}{\partial z} \right) \frac{1}{\rho} + f \cdot v \right) dz = 0 \quad (3.3.1)$$

$$\int \left(\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(v)}{\partial x} \cdot u + \frac{\partial(v)}{\partial y} \cdot v + \left(\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau}{\partial z} \right) \frac{1}{\rho} - f \cdot u \right) dz = 0 \quad (3.3.2)$$

$$\int \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) dz = 0 \quad (3.3.3)$$

Hastigheten w i z -led har antagits vara noll samt tätheten ρ har antagits som konstant.

Om $\frac{\partial Y}{\partial t}$ försummas och om u' , v' är funktioner av enbart z kan de enskilda termerna i ekv. (3.3.1), (3.3.2) och (3.3.3) integreras över djupet enligt följande

$$\int_{-B}^Y \frac{\partial u}{\partial t} dz = \frac{\partial (\bar{u}H)}{\partial t}$$

I fortsättningen försummas dessutom också derivatorna $\frac{\partial Y}{\partial x}$, $\frac{\partial Y}{\partial y}$

$$\int_{-B}^Y \frac{\partial(u)}{\partial x} \cdot u dz = \frac{\partial}{\partial x} (\bar{u} \cdot \bar{u} \cdot H) + (\bar{u} \cdot \bar{u}) \frac{\partial B}{\partial x}$$

$$\int_{-B}^Y \frac{\partial(u)}{\partial y} \cdot v dz = \frac{\partial}{\partial y} (\bar{u} \cdot \bar{v} \cdot H) + (\bar{u} \cdot \bar{v}) \frac{\partial B}{\partial y}$$

$$\int_{-B}^Y \frac{\partial p}{\partial x} dz = \rho g H \frac{\partial B}{\partial x}$$

$$\int_{-B}^Y \frac{\partial}{\partial z} dz = \tau(Y) - \tau(B)$$

där $\tau(Y)$, $\tau(B)$ är skjuvspänningen vid ytan och botten respektive

$$\int_{-B}^Y f \cdot v \cdot dz = f \bar{v} H$$

Hastigheterna \bar{u} och \bar{v} är noll vid botten. Detta medför att termerna $(\bar{u} \cdot \bar{u}) \frac{\partial B}{\partial x}$ och $(\bar{u} \cdot \bar{v}) \frac{\partial B}{\partial y}$ också är noll eftersom de representeras av sina diskreta värden för $z = -B$.

Integreras på så sätt ekv (3.3.2) och (3.3.3) under samma förutsättningar erhålles ett ekvationssystem som styr flödet i en två-dimensionell modell. Efter insättning av delintegralerna övergår ekv därefter i

$$\frac{\partial(H\bar{u})}{\partial t} + \frac{\partial(H\bar{u} \cdot \bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial(H\bar{u} \cdot \bar{v})}{\partial y} + f H \bar{v} + g H \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{1}{\xi} (\tau(Y) - \tau(B)) = 0 \quad (3.3.4)$$

$$\frac{\partial(H\bar{v})}{\partial t} + \frac{\partial(H\bar{v} \cdot \bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial(H\bar{v} \cdot \bar{v})}{\partial y} - f H \cdot \bar{u} + g H \frac{\partial H}{\partial y} + \frac{1}{\xi} (\tau(Y) - \tau(B)) = 0 \quad (3.3.5)$$

$$\frac{\partial(H\bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial(H\bar{v})}{\partial y} = 0 \quad (3.3.6)$$

Skjuvspänningen $\tau(Y)$, som uppträder vid vattenytan, orsakas främst av vindkrafterna, medan skjuvspänningen $\tau(B)$ vid botten bl a beror av tidvattenflödet.

Skjuvspänningen $\tau(Y)$ är i grunda, tidvattendominerade områden av mindre storleksordning varför den kan försummas vid sidan av $\tau(B)$.

Enl [10] är bottenspanningen $\tau(B)$ proportionell mot roten ur kvadratsumman av medelhastigheterna \bar{u} och \bar{v} .

$$\tau(B)_x = \xi g \bar{u} \frac{\sqrt{\bar{u}^2 + \bar{v}^2}}{c^2} \quad (3.3.4)$$

$$\tau(B)_y = \xi g \bar{v} \frac{\sqrt{\bar{u}^2 + \bar{v}^2}}{c^2} \quad (3.3.8)$$

c = Chezys koefficient $[m^{1/2}/s]$, som är beroende av bottenråheten och av vattendjupet.

Substitueras dessa uttryck för skjuvspänningarna $\bar{\tau}(B)_x$ och $\bar{\tau}(B)_y$ i ekvation (3.3.4) och (3.3.5) övergår dessa i

$$\frac{\partial(H\bar{u})}{\partial t} + \frac{\partial(H\bar{u} \cdot \bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial(H\bar{u} \cdot \bar{v})}{\partial y} + f H \bar{v} + g H \frac{\partial H}{\partial x} + g \bar{u} \frac{\sqrt{\bar{u}^2 + \bar{v}^2}}{c^2} = 0 \quad (3.3.9)$$

$$\frac{\partial(H\bar{v})}{\partial t} + \frac{\partial(H\bar{v} \cdot \bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial(H\bar{v} \cdot \bar{v})}{\partial y} - f H \bar{u} + g H \frac{\partial H}{\partial y} + g \bar{v} \frac{\sqrt{\bar{u}^2 + \bar{v}^2}}{c^2} = 0 \quad (3.3.10)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(H\bar{u})}{\partial x} + \frac{\partial(H\bar{v})}{\partial y} = 0 \quad (3.3.11)$$

Dessa tre ekvationer utgör de grundläggande sambanden för en flödesmodell i ett naturligt tidvattensystem. De två första ekvationerna representerar kraftbalansen i horisontalplanet medan den sista ekvationen anger kontinuitetssambandet i samma modell. Ekvationerna är väl lämpade för beräkning enligt finit-differensmetod och med hjälp av datateknik.

4. MASSTRANSPORT AV EN SUBSTANS I ETT VATTENSYSTEM

4.1 Allmänt

I den under kapitel 2 förda diskussionen betraktades vattnet själv som den primärt transporterade masssubstansen. I detta avsnitt betraktas vattnet endast som ett transportmedium i vilket ett löst eller dispergerat ämne transporteras i ett vattensystem. Begreppet koncentration är då grundläggande och definieras som den mängd ämnen som finns löst eller dispergerat i en enhetsvolym av vattenmassan.

Transporten av ett ämne, löst eller dispergerat, i en vattenmassa är sammansatt av två mekanismer, advektion och diffusion. Den advektiva delen svarar mot ett flöde medan transporten genom diffusionen sätts, enligt klassisk teori, proportionell mot koncentrationsgradienten.

4.2 Diffusions- advektionsekvationen i tre dimensioner

För att ställa upp en generell massflödesmodell enl detta betraktelse-sätt, kan man som tidigare analysera en enhetsvolym $dV = dx \cdot dy \cdot dz = 1 \cdot 1 \cdot 1 = 1$.

Enhetsvolymen orienteras enl fig 4.2.1

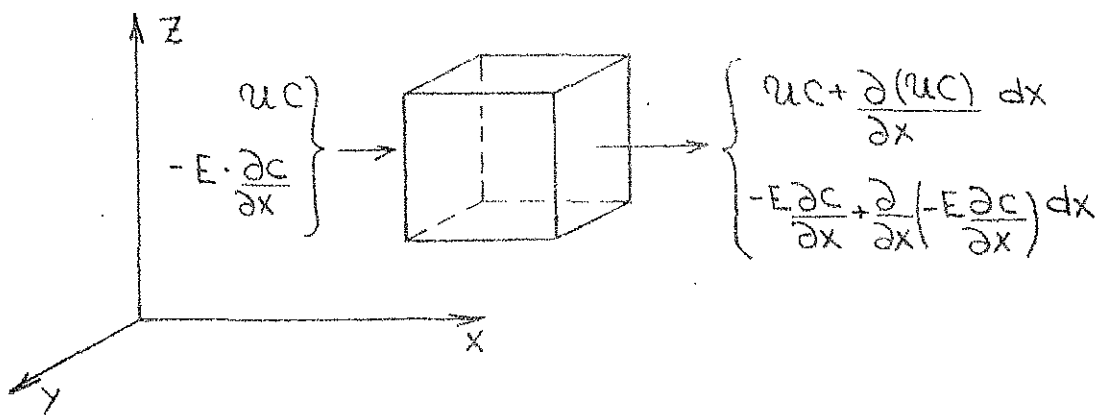


FIG. 4.2.1

Ställer man upp en balanssekvation för massflödet, genom enhetsvolymen enl fig 4.2.1 i de tre koordinatriktingarna erhålles

$$\begin{aligned}
 & u \cdot c \cdot dy \, dz - \left(u \cdot c + \frac{\partial(u \cdot c)}{\partial x} dx \right) dy \, dz \\
 & - E \frac{\partial c}{\partial x} dy \, dz - \left(-E \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-E \frac{\partial c}{\partial x} \right) dx \right) dy \, dz \\
 & + v \cdot c \, dx \, dz - \left(v \cdot c + \frac{\partial(v \cdot c)}{\partial y} dy \right) dx \, dz \\
 & - E \frac{\partial c}{\partial y} dx \, dz - \left(-E \frac{\partial c}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left(-E \frac{\partial c}{\partial y} \right) dy \right) dx \, dz \\
 & + w \cdot c \, dx \, dy - \left(w \cdot c + \frac{\partial(w \cdot c)}{\partial z} dz \right) dx \, dy \\
 & - E \frac{\partial c}{\partial z} dx \, dy - \left(-E \frac{\partial c}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(-E \frac{\partial c}{\partial z} \right) dz \right) dx \, dy \\
 & = \frac{\partial c}{\partial t} dx \, dy \, dz
 \end{aligned} \tag{4.2.1}$$

En klassisk molekylär diffusionsteori är mängden diffunderad substans proportionell mot koncentrationsgradienten. Eftersom diffusionen sker i positiv koordinatriktning för negativ gradient skall diffusionstermerna införas med negativt tecken enl fig 4.2.1 för att man ska få rätt tecken i ekvation (4.2.1)

Efter förkortning med dx dy dz och efter omflyttning av termer övergår ekvation (4.1.1) med tillägg av en källterm q till

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial(u \cdot c)}{\partial x} + \frac{\partial(v \cdot c)}{\partial y} + \frac{\partial(w \cdot c)}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \left(E \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(E \frac{\partial c}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(E \frac{\partial c}{\partial z} \right) = q \quad (4.2.2)$$

c = koncentrationer

E = turbulenta diffusionskoefficienter

q = källflöde per enhetsvolym

Första termen i vänstra ledet uttrycker ändringen per tidsenhet av masskoncentrationen, de tre följande den advektiva transporten och de tre sista i vänstra ledet den diffusiva transporten. Högra ledet är en källterm som anger produktionen, eller nedbrytningen av en substans per enhetsvolym och tidsenhet.

4.3 Diffusions- advektionsekvationen i två dimensioner

Ekvation (4.2.2) representerar den generella tredimensionella advektion-diffusionsekvationen. I naturliga vattensystem är ofta den vertikala hastighetskomponenten av underordnad betydelse i förhållande till de två hastighetskomponenterna i horisontalplanet. Om man dessutom förutsätter att vattnet är välblandat i vertikalled utgår de två termerna

$\frac{\partial}{\partial z} (w \cdot c)$ och $\frac{\partial}{\partial z} E \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)$ ur ekvation (4.2.2) som då övergår i

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial(uc)}{\partial x} + \frac{\partial(vc)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(E \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(E \frac{\partial c}{\partial y} \right) = q \quad (4.2.3)$$

Om vattendjupet varierar måste ekv (4.2.3) integreras i vertikalled för att erhålla en allmän två-dimensionell modell.

Vattendjupet $H = Y + B$

Hastigheten utefter x-axeln $u = \bar{u} + u'$

" " y- " $v = \bar{v} + v'$

Koncentrationen utefter z-axeln $c = \bar{c} + c'$

Termvis integration av ekv (4.2.3) ger med förutsättningen att vattenytans nivå är konstant i förhållande till lägeskoordinaterna i horisontalplanet, och oberoende av tiden diffusionskoefficienterna E varierar samt att strömhastigheterna $U(-B) = v(-B) = 0$

$$\int_{-B}^Y \frac{\partial c}{\partial t} dz = \frac{\partial(\bar{c}H)}{\partial t} \quad (4.2.4)$$

$$\int_{-B}^Y \frac{\partial}{\partial x} (uc) dz = \frac{\partial(\bar{u}\bar{c}H)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \int_{-B}^Y (u'c') dz \quad (4.2.5)$$

$$\int_{-B}^Y \frac{\partial(vc)}{\partial y} dz = \frac{\partial(\bar{v}\bar{c}H)}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \int_{-B}^Y (v'c') dz \quad (4.2.6)$$

Diffusionskoefficienten E antages vara konstant över djupet z varvid de enskilda diffusionstermerna kan integreras enl följande

$$\int_{-B}^Y \frac{\partial}{\partial x} \left(E \frac{\partial c}{\partial y} \right) dz = - \frac{\partial}{\partial x} \left(EH \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) - \left(E \frac{\partial c}{\partial x} \right) \frac{\partial B}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \int_{-B}^Y E \frac{\partial c'}{\partial x} dz \quad (4.2.7)$$

$$\int_{-B}^Y \frac{\partial}{\partial y} \left(E \frac{\partial c}{\partial y} \right) dz = - \frac{\partial}{\partial y} \left(EH \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) - \left(E \frac{\partial c}{\partial y} \right) \frac{\partial B}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \int_{-B}^Y E \frac{\partial c}{\partial y} dz \quad (4.2.8)$$

$$\int_{-B}^Y q dz = qH \quad (4.2.9)$$

Den sista termen i ekv (4.2.5) och (4.2.7) samt i ekv (4.2.6) och (4.2.8) summeras respektive, varvid följande definition kan införas

$$\frac{\partial}{\partial x} \int_{-B}^Y (u'c' - E \frac{\partial c'}{\partial x}) dz = - \frac{\partial}{\partial x} (DH \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}) \quad (4.2.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \int_{-B}^Y (v'c' - E \frac{\partial c'}{\partial y}) dz = - \frac{\partial}{\partial y} (DH \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}) \quad (4.2.11)$$

D = Dispersionskoefficient

En sammanställning av de enskilda, integrerade termerna enl ekv (4.2.3) ger

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{c}H) + \frac{\partial}{\partial x} (\bar{u}\bar{c}H) + \frac{\partial}{\partial y} (\bar{v}\bar{c}H) - \frac{\partial}{\partial x} \left((E + D) H \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) - \left(E \frac{\partial c}{\partial x} \right) \frac{\partial B}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \left((E + D) H \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) - \left(E \frac{\partial c}{\partial y} \right) \frac{\partial B}{\partial y} = qH \quad (4.2.12)$$

Termerna $\left(E \frac{\partial c}{\partial x} \right) \frac{\partial B}{\partial x}$, $\left(E \frac{\partial c}{\partial y} \right) \frac{\partial B}{\partial y}$ anges i ekv (4.2.12) med sina diskreta värden för $z = -B$.

Derivatorna $\frac{\partial B}{\partial x}$, $\frac{\partial B}{\partial y}$ betecknar bottenlutningen i respektive koordinat-riktning.

Den ovan definierade dispersionskoefficienten : är av en större storleksordning än den tidigare nämnda diffusionskoefficienten och dominerar sålunda över denna.

Summan av $E + D$ brukar benämnas för den totala turbulenta diffusion - dispersionskoefficienten. För att förenkla benämning och skrivsätt kommer den i fortsättningen att endast benämnas som en diffusionskoefficient och betecknas med E .

Under givna förutsättningar att $E \ll D$ blir termerna $E \frac{\partial c}{\partial x} \cdot \frac{\partial B}{\partial x}$, $E \frac{\partial c}{\partial y} \cdot \frac{\partial B}{\partial y}$ av underordnad betydelse i förhållande till de två övriga diffusionstermerna och kan försummas, fjr [10]

Den härledda två-dimensionella modellen, ekv (4.2.12) förenklas under dessa förutsättningar och övergår i

$$\frac{\partial(cH)}{\partial t} + \frac{\partial(ucH)}{\partial x} + \frac{\partial(vcH)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} (EH \frac{\partial c}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y} (EH \frac{\partial c}{\partial y}) = R \quad (4.2.13)$$

R = källterm som är relaterad till volymen $dx \cdot dy \cdot H$.

Denna form av den tvådimensionella diffusionsadvektionsekvationen ekv (4.2.13) är publicerad av Leendertse [10].

Tillsammans med flödesekvationerna (3.3.9) och (3.3.10) samt kontinuitetsekvationen (3.3.11) har den tvådimensionella diffusionsadvektionsekvationen (4.2.13) praktiskt tillämpats på estuarien Jamaica Bay, Long Island, New York. Modellen har använts för att bestämma biokemisk syreförbrukning, syreunderskott och den coliforma bakterietätheten och därmed ge ett kvantitativt mått på vattenkvaliteten i ett långt drivet urbaniseringsområde.

4.4 Diffusions- advektionsekvationen i en dimension

För att möjliggöra en praktisk tillämpbar beräkningsmodell reducerades tidigare den generella tre-dimensionella modellen till en två-dimensionell. I många vattensystem kan emellertid det huvudsakliga flödet betraktas som endimensionellt. Om man vidare antar att vertikala gradienter är små och att någon koncentrationsgradient inte finns i tvärled reduceras diffusionsadvektionsekvationen till endimensionell form.

Massflödet genom vattensystemet kan enkelt härledas enl följande:

Betrakta en tvärsektion av flödet med längden dx enl fig 4.4.1

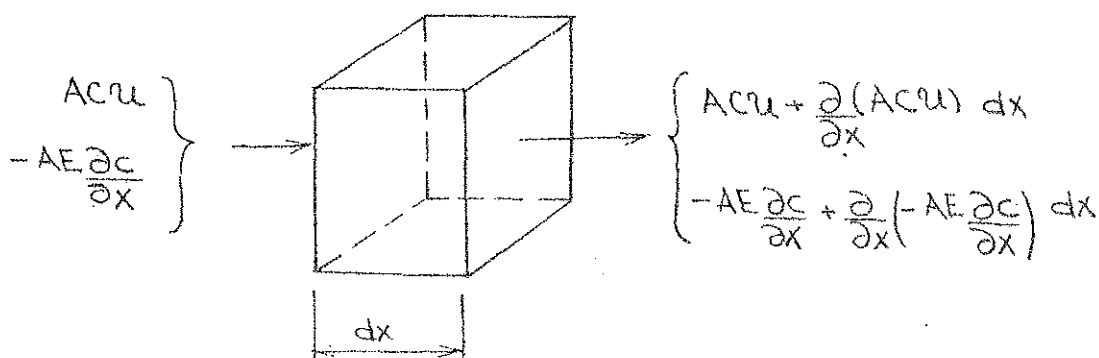


FIG. 4.4.1

En massbalansekvation för volymen dV uppställs som skillnaden mellan totala inflödet och utflödet av en studerad substans.

$$A_{cu} - AE \frac{\partial c}{\partial x} - \left(A_{cu} + \frac{\partial}{\partial x} (A_{cu}) dx \right) - \left(-AE \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-AE \frac{\partial c}{\partial x} \right) dx \right) + Q = \frac{\partial (cA)}{\partial t} \quad (4.4.1)$$

Efter reducering och omflyttning av termer övergår ekv 4.4.1 i

$$\frac{\partial (cA)}{\partial t} + \frac{\partial (A_{cu})}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(AE \frac{\partial c}{\partial x} \right) = R \quad (4.4.2)$$

$\frac{\partial (cA)}{\partial t}$ = ändringen av mängden studerad substans per tidsenhet.

$\frac{\partial (A_{cu})}{\partial x}$ = ändringen i det advektiva massflödet per enhetslängd av volymen.

$\frac{\partial}{\partial x} \left(AE \frac{\partial c}{\partial x} \right)$ = ändringen i det diffusiva massflödet per enhetslängd av volymen.

R = källterm som anger mängd in eller utflöde, produktion eller nedbrytning av substans per enhetslängd av volymen.

Den endimensionella diffusions- advektionsekvationen är lätt att lösa med hjälp av numerisk datateknik. Trots de förenklade antagande som gjorts speglar modellen väl masstransporten av en substans genom långsträckta vattensystem av typ floder, fjordar, estuarier etc. Omvänt anger ekvationen koncentrationsutvecklingen för såväl stationära som icke stationära tillstånd. I kap 8 har modellen tillämpats på Byfjorden, Uddevalla.

Humpty Dumpty looked doubtful. "I'd rather see that done on paper", he said.

Alice took out her memorandum-book, and worked the sum for him:

365

-1

364

Humpty Dumpty took the book, and looked at it very carefully. "That SEEMS to be done right - " he began.

"You are holding it upside down."

Alice interrupted. "To be sure I was."

Humpty Dumpty said gaily, as she turned it round for him.

5. DIFFUSIONSMEKANISMEN

5.1 Allmänt

Den totala substanstransporten som orsakas av diffusion kan uppdelas på tre olika mekanismer: molekylär diffusion, turbulent diffusion och dispersion. Dessa tre mekanismer är åtskilda från varandra såväl vad beträffar storleksordning som deras natur. I allmänhet pågår de tre faserna samtidigt och samverkar till den totala diffusiva transporten av substans.

Molekylär diffusion

Den molekylära diffusionen, som är den minsta av de tre nämnda transportfaserna, är att betrakta som en naturlag vilken matematiskt kan sammanfattas i Fick's lag. Denna säger att den diffunderande massan per tidsenhet är proportionell mot gradienten för koncentrationen. Vid molekylär diffusion sker masstransporten genom ett diskret partikelflöde i riktning mot områden med lägre koncentration. Molekylär diffusion uppstår p g a molekylernas termiska rörelse s k Brownsk rörelse.

Turbulent diffusion

Vid den turbulenta diffusionen orsakas spridningen av hastigheterna u' , v' och w' , j f r ekv (4.2.10), (4.2.11). Hastigheterna u' , v' och w' definieras som de turbulenta hastighetsfluktuationerna från medelhastigheterna \bar{u} , \bar{v} och \bar{w} .

Till sin natur är den turbulenta diffusionen skild från den molekylära genom att masssubstanten i vattnet betraktas som kontinuerlig, j f r fig 5. 1. 1.

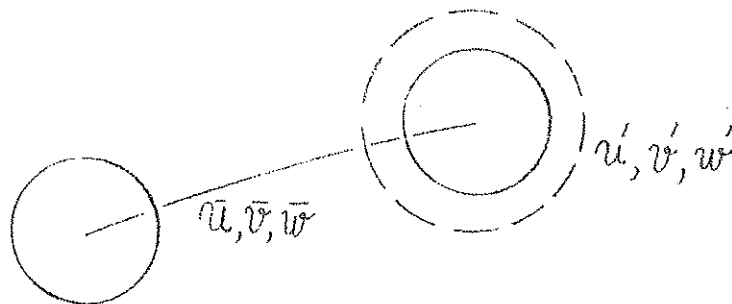


FIG. 5.1.1 TURBULENT DIFFUSION.

Det finns flera metoder för att beskriva och lösa turbulenta diffusionsproblem men det är främst två som mera allmänt används. Båda bygger på statistisk teori. Den första av dessa utnyttjar teorin för kontinuerliga stokastiska processer och den andra metoden utnyttjar teorin för random walk. För den intresserade hänvisas till [20] .

Dispersion

Dispersionen är den dominerande mekanismen för longitudinell spridning i friktionsflöden såsom floder, grunda estuarier m m. Hastighetsgradienter i lateral- eller vertikalled "töjer ut ett vattenpaket" i flödets längdriktning.

Dispersion kan förenklat beskrivas som en turbulent diffusion i stor skala. I grunden föreligger emellertid en väsentlig skillnad i förhållande till både den molekylära och den turbulenta diffusionen, som båda är stokastiska processer. Dispersion av substans sker genom systematiska skillnader i hastighetsfälten u , v och w .

Effekten av denna mekanism, som i allmänhet är kontinuerlig, har i fig 5. 1. 2 visats för en diskret hastighetsvariation i en dimension.



FIG. 5.1.2 DISPERSION.

5.2 Teoretisk beräkning av diffusionskoefficienter

För att på teoretisk väg bestämma ett samband mellan diffusionskoefficienter och medelhastighet hos flödet, djupet och bottenråheten kan man utgå ifrån ett endimensionellt stationärt flöde [5], [10].

Diffusionskoefficienten parallellt med flödet kan enl [10] uttryckas som

$$E = 0.55 H \cdot \bar{u}^* \quad [\text{m}^2/\text{s}] \quad (5.2.1)$$

H = vattendjupet

\bar{u}^* = friktionshastighet

För sambandet mellan friktionshastighet och medelhastighet gäller

$$\bar{u} = \left(\frac{\tau_0}{\rho} \right)^{1/2} = \bar{u} g^{1/2} c^{-1} \quad (5.2.2)$$

g = jordaccelerationen

c = Chezy's koefficient

τ_0 = bottenskärspänning

Dessa samband ger

$$E = 0.55 H \bar{u} g^{1/2} c^{-1} \quad (5.2.3)$$

Enl [10] kan den laterala turbulenta diffusionen uppskattas till

$$E_y = 0.021 H u^* \quad (5.2.4)$$

Förhållandet mellan E_x och E_y är då approximativt

$$\frac{E_x}{E_y} = \frac{0.55}{0.021} = 26 \quad (5.5.5)$$

Av ekvation (5.2.5) framgår att diffusionskoefficienten längs ett en-dimensionellt flöde är ca 26 gånger större än vinkelrät mot flödesriktningen.

Enl Harleman [7] kan man ange diffusionskoefficienten i tidvattenestuarier som en funktion av Mannings tal M , hastigheten u och hydrauliska radien R enl

$$E = 7,15 \cdot \frac{u \cdot R^{5/6}}{M} \quad (5.2.6)$$

$$u = u_N + u_T \sin \alpha t \quad (5.2.7)$$

där u_N = nettohastigheten när $\sin \alpha t = 0$

u_T = maximihastigheten av tidvattenflödet

= $\frac{2\pi}{T}$ = tidvattenfrekvensen

T = tidvattenperioden

Enl Al-Saffar [19] kan diffusionskoefficienten bestämmas som en funktion av Reynolds tal Han fann för flöden i öppna kanaler att diffusionskoefficienten kunde approximeras med

$$E = 4,41 \cdot 10^{-8} (\text{Re})^{0.85} \quad (5.2.8)$$

$$\text{Re} = u H \rho / \mu$$

Ekv (5.2.8) är värd att uppmärksammas då den är enkel i sin uppbyggnad och som enda parameter ingår Reynolds tal.

Glenne [5] har utgående från fältstudier i San Francisco Bay, utvärderat att diffusionskoefficienten varierade som $(\bar{u})^{0.75}$ vilket stämmer väl överens med ekv. (5.2.8)

Diffusionskoefficienten är som framgått både tids- och rumsberoende och någon allmän funktion som på ett entydigt sätt framställer den är svår att åstadkomma.

Hastighetsfördelningen i sektionens tvärsnitt är av avgörande betydelse för dispersionskoefficientens storlek. I floder med enkel geometri kan den ganska väl förutsägas medan det i estuarier, fjordar etc är vanskligt att bestämma dispersionskoefficienten på teoretisk väg. Inverkan av söt-vattengenomströmning, tidvatten, vind, bottenpografi och täthetsskiktning har relativt sett olika effekt i olika områden.

5.3 Beräkning av diffusionskoefficienter med hjälp av spårämnesförsök

För att kunna inkludera alla de lokala faktorer som kan påverka diffusionskoefficienten i ett speciellt vattensystem kan denna beräknas utgående från transport- och kontinuitetssamband för ett naturligt eller artificiellt tillfört spårämne.

Bland naturliga spårämnen kan nämnas salt (klorider), totalfosfor, kisel m fl och bland artificiella är radioaktiva isotoper och fluoriserande färger såsom Rodamin B de vanligaste.

Förfarandet är förmodligen överlägset alla teoretiska beräkningar för att erhålla de totala diffusionskoefficienterna för ett specifikt vattensystem. Vid planering av ett vattenområdes utnyttjande som recipient borde spårämnesförsök kunna användas som en standardmetod för att bestämma spridning och koncentrationsutveckling från alternativa utsläppspunkter. Härefter kan man bestämma vilken reningsgrad ett reningsverk minst ska ha för att en viss föroreningsbelastning ej ska överskridas i vattensystemet ifråga.

Endast det endimensionella fallet skall här behandlas och tekniken är då

den att man ifrån uppmätt koncentrationsutveckling bestämmer diffusionskoefficienterna med hjälp av den endimensionella advektions-diffusionsekvationen. Om man inför den förenklingen att vattennivån är oberoende av tiden kan ekv (4.4.2) skrivas som

$$A \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial(Auc)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (EA \frac{\partial c}{\partial x}) = R \quad (5.3.1)$$

Diffusionskoefficienten E , som är den storhet som skall lösas, ingår som en förstaderivata i diffusionstermen. För att eliminera denna derivata integreras ekv 5.3.1 med avseende på x .

$$\int_0^X A \frac{\partial c}{\partial t} dx + (Auc)_X - (EA \frac{\partial c}{\partial x})_X = \int_0^X R dx \quad (5.3.2)$$

Funktionerna Auc , $EA \frac{\partial c}{\partial x}$, som ingår i ekv (5.3.2) sätts lika med sina diskreta värden i koordinaten $x = X$.

Integralen beräknas från den punkt där arean $A = 0$ eller koncentrationen $c = 0$.

Ekvationen representerar en massbalansekvation för hela vattensystemet innanför snitt $x = A$. Den första termen anger massändringen per tidsenhet, den andra det advektiva massflödet den tredje termen i vänstra ledet det diffusiva massflödet genom snitt $x = X$.

Högra ledet anger den totala tillförda eller bortförda masssubstans per tidsenhet innanför samma snitt.

Vid numeriska beräkningar är det praktiskt att ersätta integralerna med summatecken varefter ekv 5.3.2 med omflyttning av termer blir

$$EA \frac{\partial c}{\partial x} = Auc + \sum_0^X A \cdot \frac{\Delta c}{\Delta t} \cdot \Delta x - \sum_0^X Q_j \quad (5.3.3)$$

Q_j = summan av källtermer till och med snitt $x = X$ och sammanfattar tillsatt, bortförd, nyskapad och nedbruten substansmängd.

Då koncentrationsutvecklingen och det advektiva flödet i tiden är känt är det lätt att lösa diffusionskoefficienterna.

De krav och approximationer som man måste lägga på ekv 5.3.3 samt diffusions- advektionsekvationerna vid en praktisk beräkning kan sammanfattas i följande punkter.

1. Det betraktade ämnet måste följa vattnets rörelser.
2. Vattensystemet måste vara väl blandat i lateral- och vertikalled så att den horisontella koncentrationsgradienten är representativ för systemet.
3. Koncentrationsgradienten måste vara tillräckligt stor både för att undvika provtagningsfel och beräkningsfel vid lösningsproceduren. ^x
4. Diffusionskoefficienten är den "totala" turbulenta diffusionsdispersionskoefficienten.
5. Parametrarna A, E, u och c är genomsnittsvärden.
6. Vattendjupet antas konstant i tiden.

x Anm. Ekv 5.3.3 har en stor numerisk känslighet vid en flack koncentrationsgradient. Antag ex vid att $\frac{\partial c}{\partial x} \rightarrow 0, \Rightarrow E \rightarrow \infty$.

6. NUMERISK LÖSNING AV DIFFUSIONS- ADVEKTIONSEKVATIONEN

6.1 Allmänt

För vissa specialfall är det möjligt att lösa diffusions- advektionsekvationen analytiskt. Då diffusionskoefficienten, tvärsnittsarean eller källtermen varierar måste man dock approximera differentialekvationerna med finita differensekvationer. Differensekvationerna kan sedan lösas med hjälp av numeriska metoder.

Litteraturen om finita-differensapproximationer till hyperboliska och

paraboliska ekvationer är både ingående och omfattande men praktiskt tillämpbara beräkningsmodeller för vattensystem är mycket få. Här presenteras några möjliga lösningsmetoder för advektions- diffusions- ekvationen i en dimension.

6.2 Endimensionell modell

Om man som tidigare antar vattendjupet oberoende av tiden kan advektions- diffusionsekvationen skrivas

$$A \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(EA \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (Acu) + R \quad (6.2.1)$$

Begynnelse- och gränsvillkoren måste vara kända och kan formuleras om som

$$\begin{aligned} c(x, 0) &= f_1(x) \quad , & 0 \leq x \leq L. & & t = 0 \\ c(0, t) &= f_2(t) \quad , & c(L, t) &= f_3(t) & t > 0 \end{aligned}$$

För att visa lösningstekniken antar vi ett idealiserat system där arean A och diffusionskoefficienten E är konstanta samt att hastigheten u och källtermen R är noll.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = E \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (6.2.2)$$

Ekv (6.2.2) ersätts med en finit-differensekvation.

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} = \frac{E}{(\Delta x)^2} (c_{j+1}^n - 2c_j^n + c_{j-1}^n) \quad (6.2.3)$$

eller

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} = \frac{E}{(\Delta x)^2} (c_{j+1}^{n+1} - 2c_j^{n+1} + c_{j-1}^{n+1}) \quad (6.2.4)$$

$c_j^n = c(j\Delta x, n\Delta t)$, är en approximation av koncentrationen i koordinaten x vid tiden t .

$$j = 1, 2, 3, \dots, J-1$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

$\Delta t =$ Steglängd i tiden

$\Delta x =$ " i x-led

Ekv (6.2.3) brukar betecknas för en explicit modell då den enda obekanta är c_j^{n+1} , som direkt kan lösas ut i varje beräkningssteg. Ekv (6.2.4) är en implicit modell där den obekanta c_j^{n+1} uttrycks som en funktion av en annan obekant variabel, c_{j+1}^{n+1} ; det förutsätts att c_{j-1}^{n+1} är känd genom randvillkoret för $j = 1$ och $t \geq 0$.

För varje tidsteg kan emellertid den obekanta c_j^{n+1} successivt lösas som en funktion av c_{j+1}^{n+1} tills dess att man kommer till $j = J-1$, där man känner c_{j+1}^{n+1} , som är ett av randvillkoren, varvid c_j^{n+1} kan lösas ut. Genom återsubstitution kan sedan c_j^{n+1} lösas för alla j för detta tidsteg.

Tekniken påminner om Gausseliminationen för ekvationssystem. Det kan därför vara lämpligt att uttrycka de successiva ekvationerna i matrisform.

$$[A] [C] = [B] \quad (6.2.5)$$

$[A]$ är en tridiagonal matris, d v s en matris av ordningen $(J-1) \times (J-1)$ där varje rad har tre element, som är skilda från noll, ordnade symmetriskt kring diagonalen, utom första och sista raden som endast har två.

Matriserna $[A]$ och $[B]$ är kända, matrisen $[C]$ innehåller de obekanta c_j^{n+1} .

B innehåller bl a randvillkoren. För att separera dessa från ev andra termer i B kan ekv (6.2.5) ändras till

$$[A] [C] = [D] + [R] \quad (6.2.6)$$

Termen $(1 + \frac{2 E \Delta t}{(\Delta x)^2})$ utgör diagonalelement i $[A]$ medan $\frac{E \Delta t}{(\Delta x)^2}$ utgör vänster- och högerelement omkring diagonalen i samma matris.

Fördelen med denna implicita lösningsmetodik är att tidssteget Δt kan väljas oberoende av längdsteget Δx . Tyvärr finns en del nackdelar också, bl a är modellen svårare att programmera än en explicit modell dessutom är modellen känslig för plötsliga koncentrationsändringar som orsakar en fortskridande "chockvåg" som deformerar lösningen se [10], [16], [17].

Vi återvänder till ekv (6.2.1) och en explicit lösningsmetod och approximerar differentialerna med differenser enl följande beteckningar.

$$A \frac{\partial c}{\partial t} = A_j \left(\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} \right) \quad (6.2.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(AE \frac{\partial c}{\partial x} \right)_j^n = \frac{(AE)_{j+\frac{1}{2}} \left(c_{j+1}^n - c_j^n \right) - (AE)_{j-\frac{1}{2}} \left(c_j^n - c_{j-1}^n \right)}{(\Delta x)^2} \quad (6.2.10)$$

$$(AE)_{j+\frac{1}{2}} = \frac{(AE)_{j+1} + (AE)_j}{2} \quad (6.2.11)$$

$$(AE)_{j-\frac{1}{2}} = \frac{(AE)_j + (AE)_{j-1}}{2} \quad (6.2.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (Acu)_j^n = \frac{(Acu)_{j+1}^n - (Acu)_{j-1}^n}{2\Delta x} \quad (6.2.13)$$

$$R_j^n = R \cdot \Delta x \quad (6.2.14)$$

R_j^n = Summa tillförd, bortförd, nyskapad och nedbruten substans per tidsenhet i segmentet Δx .

Insättes ovanstående ekv (6.2.9) - (6.2.14) i ekv (6.2.1) kan c_j^{n+1} lösas som

$$c_j^{n+1} = c_j^n + \left[\frac{(AE)_{j+\frac{1}{2}} \left(c_{j+1}^n - c_j^n \right) - (AE)_{j-\frac{1}{2}} \left(c_j^n - c_{j-1}^n \right)}{(\Delta x)^2} - \frac{(Acu)_{j+1}^n - (Acu)_{j-1}^n}{2\Delta x} + \frac{R_j^n}{\Delta x} \right] \frac{\Delta t}{A_j} \quad (6.2.15)$$

För att ekvationen skall vara användbar fordras att dels begynnelsekoncentrationen c , för $x \in [0, L]$ är känd, dels att randvillkoren för c , $x \in \{0, L\}$ och $t > 0$ är kända eller kan beräknas.

6.3 Inre randvillkor

Vid en begränsningsyta t ex innersta delen av ett endimensionellt vattensystem, gäller teoretiskt som randvillkor, att koncentrationsgradienten $\frac{\partial c}{\partial x} = 0$ förutsatt att inget advektivt flöde går genom sektionen. Detta villkor innebär att ingen diffusiv transport sker genom begränsningsytan. I differensform kan detta randvillkor approximeras på flera sätt.

För den inre delen av ett "endimensionellt" vattensystem kan enl [7] denna uppskattning göras så att koordinataxeln x orienteras så att $x = 1 \cdot \Delta x$ placeras där koncentrationsgradienten $\frac{\partial c}{\partial x} = 0$. För detta s k reflexiva randvillkor gäller då $c(0, t) = c(2\Delta x, t)$, jfr fig 6.3.1.

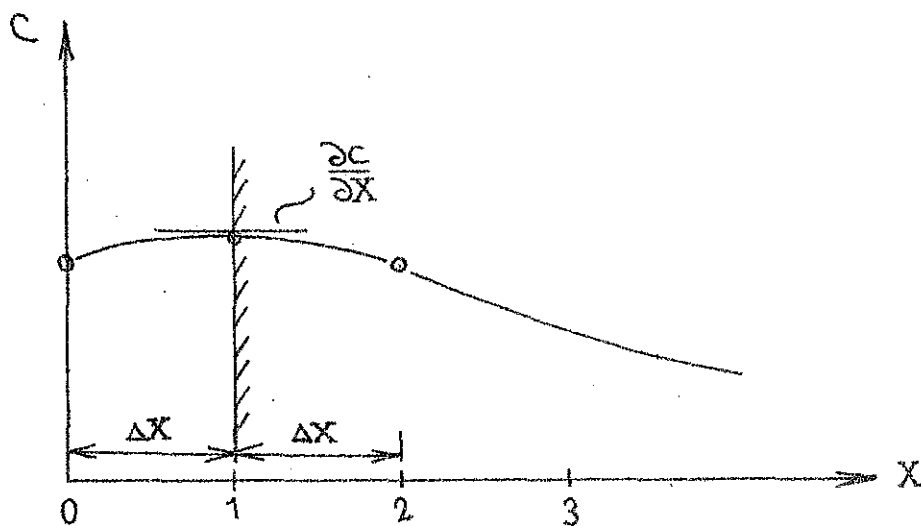


FIG. 6.3.1 REFLEKTIVT RANDVILLKOR.

Detta randvillkor kan endast i undantagsfall användas då vattensystemet är slutet i ena riktningen. För att allteftersom tiden växer kommer koncentrationen i punkt $x = 0$ oundvikligen att alltmer närma sig koncentra-

tionen i punkt $x = \Delta x$ och mer och mer avvika från den i punkt $x = 2 \cdot \Delta x$. Ett bättre randvillkor är då att helt enkelt sätta koncentrationerna för $x = 0$ och $x = \Delta x$ lika stora.

Ett tredje och bättre alternativ kan härledas ur diffusions- advektions-ekvationen.

Orientera x -axeln så att $x = 0$ befinner sig i den punkt i vattensystemet där koncentrationsgradienten $-\frac{\partial c}{\partial x} = 0$ eller där tvärsnittsarean eller diffusionskoefficienten blir insignifikant.

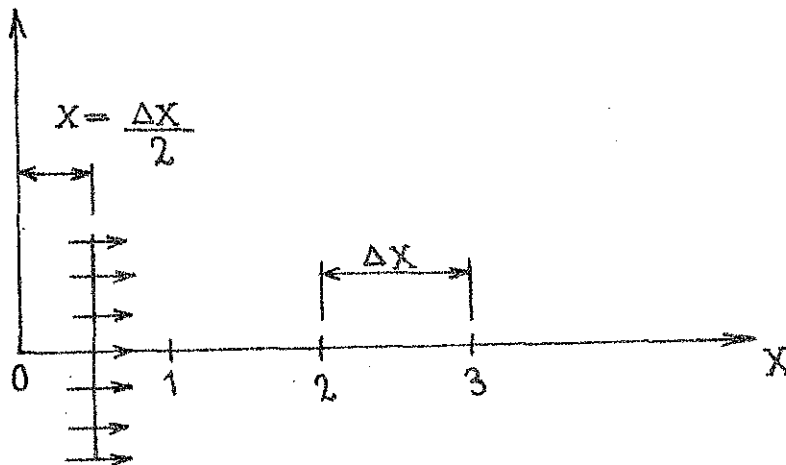


FIG. 6.3.2 INRE RANDVILLKOR

Betrakta massflödet genom ett tvärsnitt $x = \frac{\Delta x}{2}$ enl fig 6.3.2. Integreras sedan diffusions- advektionsekvationen i x -led över segmentet $0 \leq x \leq \frac{\Delta x}{2}$ enl följande

$$\int_0^{\frac{\Delta x}{2}} \frac{\partial}{\partial x} (AE \frac{\partial c}{\partial x}) dx = \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} \frac{\partial}{\partial x} (Acu) dx - \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} R dx + \int_0^{\frac{\Delta x}{2}} A \frac{\partial c}{\partial t} dx \quad (6.3.1)$$

som ger

$$AE \frac{\partial c}{\partial x} = Acu - R \frac{\Delta x}{2} + A \frac{\partial c}{\partial t} \frac{\Delta x}{2} \quad (6.3.2)$$

där termerna $AE \frac{\partial c}{\partial x}$, Au blir relaterade till snitt $x = \frac{\Delta x}{2}$

Ekv (6.3.2) kan approximeras med en differensekvation

$$AE \frac{c_1^{n+1} - c_0^{n+1}}{\Delta x} = (Au)^{n+1} - R^{n+1} \cdot \frac{\Delta x}{2} + A \frac{c_0^{n+1} - c_0^n}{\Delta t} \cdot \frac{\Delta x}{2} \quad (6.3.3)$$

där

$$(Au)^{n+1} = (Au)^{n+1} \left(\frac{c_1^{n+1} + c_0^{n+1}}{2} \right) \quad (6.3.4)$$

I ekv (6.3.3), (6.3.4) är c_0^n känd och c_1^{n+1} måste lösas med någon explicit lösningsmetod. Därefter kan c_0^{n+1} lösas ut och blir sedan vårt nya randvillkor som kan tillämpas på en godtycklig modell.

$$c_0^{n+1} = \frac{\frac{c_1^{n+1} \cdot AE}{\Delta x} + \frac{c_0^n \cdot A \cdot \Delta x}{2\Delta t} - \frac{c_1^{n+1} \cdot Au}{2} + \frac{R \Delta x}{2}}{\frac{AE}{\Delta x} + \frac{A\Delta x}{2 \cdot \Delta t} - \frac{Au}{2}} \quad (6.3.5)$$

6.4 Yttre randvillkor

Randvillkoret för koncentrationen i punkt $x = J$ kan approximeras genom att extrapolera från de två närmast innanför beräknade koncentrationerna. Extrapoleringen görs enklast rätlinjigt enl fig 6.4.1

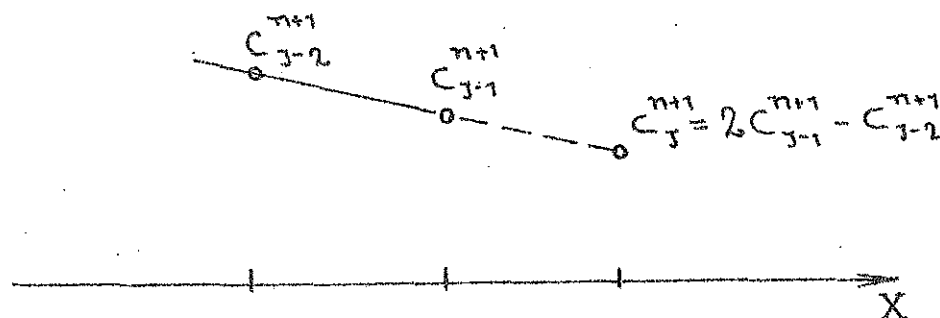


FIG. 6.4.1 YTTRE RANDVILLKOR

Om vattensystemet mynnar i havet eller i en större sjö med stor vattenomsättning kan det vara motiverat att koncentrationen för $x = J$ sättes till noll.

När så gränsvärdena på något sätt bestämts för $t > 0$ är lösningen av den finita-differensekvationen reducerad till ett begynnelsevärdesproblem.

7. EGENHETER HOS BERÄKNINGSMODELLEN

7.1 Effekter av finita differensapproximationer

Numeriska modeller måste i allmänhet lösas med hjälp av datateknik och ger sällan exakta lösningar till givna problem. Numerisk lösning till olika typer av differentialekvationer är ett exempel på detta. Teoretiskt gäller att om differensapproximationerna görs oändligt små kommer den numeriska lösningen att sammanfalla med den analytiska. Ekonomi, kapacitet och beräkningshastighet hos datamaskiner sätter emellertid här en gräns för hur små steg man kan välja i beräkningsproceduren och därmed en gräns hur nära en analytisk lösning som det är möjligt att komma. Denna begränsning utgör i allmänhet ingen belastning på den numeriska lösningstekniken kontra den analytiska.

Många matematiska modeller, avsedda att spegla fysikaliska företeelser är följande så komplicerade att man endast har en numerisk lösning att tillgå. Till denna senare kategori hör diffusions- advektionsekvationen med varabla koefficienter.

Vid numeriska beräkningar påverkas resultatet av många typer av fel. Vissa felkällor är svåra att påverka, andra kan reduceras ibland helt elimineras genom omformuleringar av uttryck etc.

Fel kan uppkomma i indata, som kan vara resultat av mätningar i fältförsök. En dator har bara minnesutrymme för ett begränsat antal siffror varför avrundningsfel alltid uppkommer under beräkningar.

Avrundningsfelen ger upphov till svåra fel om modellen är numeriskt instabil. se kap 7.2.

Trunkationsfel uppkommer när en gränsvärdesprocess avbryts. Vid många numeriska tillämpningar görs förenklningar och idealiseringar i den matematiska modellen. Effekten av denna senare typ av introducerade fel är ofta svår att uppskatta.

Vid numerisk lösning av en modell är det ibland möjligt att med analytiska metoder uppskatta de fel som eventuellt införes i lösningen och om nödvändigt göra en korrektion i efterhand, se [4],[10],[15],[16],[17].

7.2 Stabilitet

Vid en numerisk lösningsprocedur kan det under vissa förutsättningar uppstå numerisk instabilitet som gör lösningen oanvändbar. Med instabilitet menas att ett under beräkningsproceduren infört fel, som kan vara en avrundning av en approximativt riktig siffra, växer över alla gränser om beräkningstiden pågår tillräckligt länge. Instabilitet kan under vissa förutsättningar uppstå även om differensekvationen är korrekt.

Implicita lösningsmetoder är emellertid stabila, jfr [15],[16].

För att åskådliggöra vad som menas med exempelvis en implicit lösning kan en sk beräkningsmolekyl användas.

Differentialekvationen

$$\frac{\partial c}{\partial t} = E \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)$$

kan ersättas med differensekvationen, jfr fig 7.2.1

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} = E \frac{c_{j+1}^{n+1} - 2c_j^{n+1} + c_{j-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2}$$

eller, jfr fig 7.2.2.

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} = E \frac{c_{j+1}^n - 2c_j^n + c_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

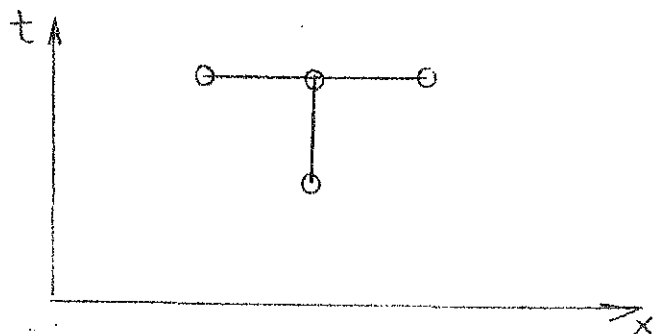


FIG. 7.2.1 IMPLICIT BERÄKNINGSMODELL

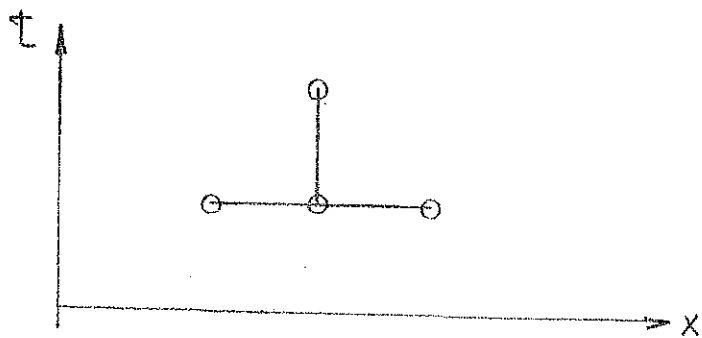


FIG. 7.2.2 EXPLICIT BERÄKNINGSMODELL

För explicita beräkningsmodeller kan i allmänhet inte steglängderna Δt och Δx väljas oberoende av varandra med kravet att modellen skall vara stabil.

Ett tillräckligt, om än inte nödvändigt, villkor för stabilitet kan härledas för modellen enligt fig 7.2.2.

Utgår man från diffusions- advektionsekvationen utan advektionsterm

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left(AE \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (7.2.1)$$

som kan approximeras med differensekvationen

$$\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} = \frac{1}{A_j} \left[\frac{(AE)_{j+1} + (AE)_j}{2(\Delta x)^2} (c_{j+1}^n - c_j^n) - \frac{(AE)_j + (AE)_{j-1}}{2(\Delta x)^2} (c_j^n - c_{j-1}^n) \right] \quad (7.2.2)$$

Löses den obekanta c_j^{n+1} ut ur ekv (7.2.2)

$$c_j^{n+1} = \frac{(AE)_{j+1} + (AE)_j}{2 A_j (\Delta x)^2} \cdot \Delta t \cdot c_{j+1}^n + \left(1 - \frac{(AE)_{j+1} + 2(AE)_j + (AE)_{j-1}}{2 A_j (\Delta x)^2} \right) \Delta t \cdot c_j^n + \frac{(AE)_j + (AE)_{j-1}}{2 A_j (\Delta x)^2} \cdot \Delta t \cdot c_{j-1}^n \quad (7.2.3)$$

eller omskrivet

$$c_j^{n+1} = A c_{j+1}^n + (1-B) c_j^n + C c_{j-1}^n \quad (7.2.4)$$

Enl definitionen är $c_j^n \geq 0, \quad \forall \{n, j\}$

Eftersom $A + C = B$ gäller, att om $B \leq 1$

$$\max c_j^{n+1} \leq (A + (1-B) + C) \max c_j^n = \max c_j^n$$

$$\max c_j^1 \leq \max c_j^{n-1} \leq \dots \leq \max c_j^0$$

Följaktligen måste $B \leq 1$ om lösningen skall vara begränsad.

Identifiering mellan ekv (7.2.3) och ekv (7.2.4) ger sedan

$$\frac{(AE)_{j+1} + 2(AE)_j + (AE)_{j-1}}{2 A_j (\Delta x)^2} \cdot \Delta t \leq 1 \quad (7.2.5)$$

Ekv (7.2.5) är ett tillräckligt villkor för stabilitet av den explicit skrivna diffusionsekvationen enl ekv (7.2.1)

Inkluderas även advektionstermen i nämnda ekv kan stabilitetskriteriet enl ekv (7.2.5) påverkas något i ogynnsam riktning.

Om arean och diffusionskoefficienterna är konstanta övergår ekv (7.2.1) till

$$\frac{2 E \cdot \Delta t}{(\Delta x)^2} \leq 1 \quad (7.2.6)$$

8. TILLÄMPNING AV DEN ENDIMENSIONELLA DIFFUSIONS-ADVEKTIONSMODELLEN PÅ OMSÄTTNINGEN AV YTVATTEN I BYFJORDEN

8.1 Allmänt

Byfjorden är ett vattensystem med många funktioner. Fjorden är inseglingsränna till hamnen i Uddevalla samt Uddevallavarvet, den är recipient för avloppsvattnet från Uddevalla reningsverk samt är ett betydande rekreationsområde för såväl turister som den lokala befolkningen. För att fjorden skall kunna bevara sin funktion som rekreationsområde för Uddevalla även i framtiden är det av stor vikt att de föroreningar som tillförs fjorden hålls på en acceptabelt låg nivå.

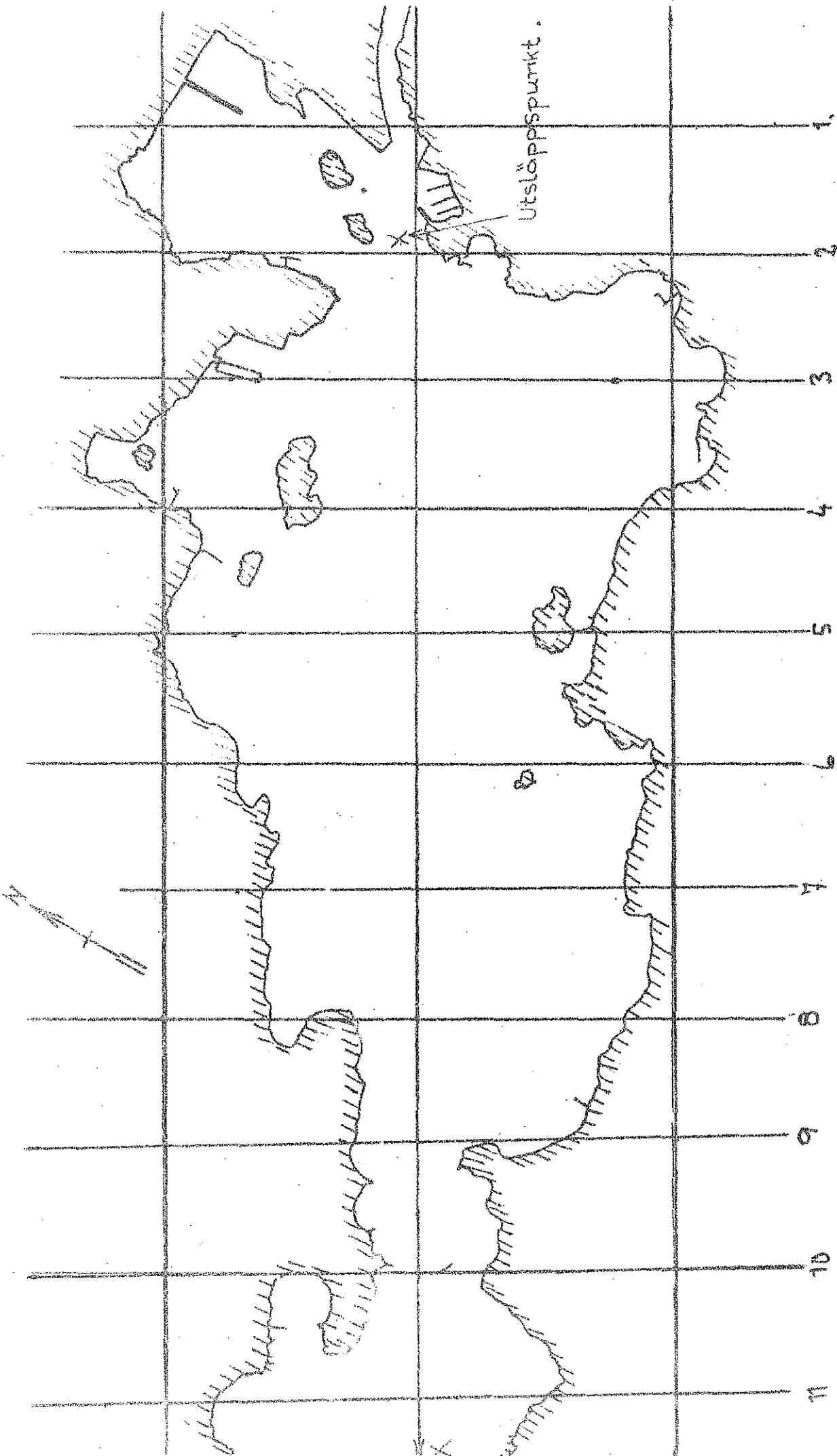
Vattendjupet i Byfjorden varierar från ca 11 m vid Sunninge sund till mer än 40 m i de centrala delerna av fjorden där det största djupet är ca 50 m. Vattenlinjearean i fjorden är 6,15 km², [6].

Salthalten i ytvattnet varierar med årstiden så att under vår och höst har fjorden en inte obetydlig genomströmning av sötvatten från sitt nederbördsområde, vilket sänker salthalten i ett ytskikt om 1-4 m tjocklek.

Under sommarhalvåret är genomströmningen av sötvatten vanligen mindre än $1 \text{ m}^3/\text{s}$ och helt försumbar i jämförelse med tidvattenströmmar och vindinducerade strömmar. Ytvattnet är då tämligen homogent med en salthalt om 20-22 ‰ ned till språngskiktet, vilket i regel är beläget från 12 till 16 m:s djup. Därunder finns ett homogent bottenvatten med en salthalt om 30-32 ‰. Det skarpa språngskiktet gör att utbytet mellan yt- och bottenvatten är kraftigt reducerat. Vattnomsättning och spridning av föroreningar i det övre skiktet kan därför, beträffande ämnen som ej ingår i det biologiska kretsloppet, behandlas som om språngskiktet ersättes av en fast botten. I detta kapitel skall diffusionskoefficienter i en endimensionell modell för ytvattnet beräknas, utgående från spårämnesförsök 11 och modellen skall sedan tillämpas för numerisk simulering av koncentrationsfördelningen vid avloppsutsläpp från Uddevalla kommun.

8.2 Diffusionskoefficienter

För tidvattenpåverkade vattensystem som fjordar, estuarier etc varierar diffusionskoefficienterna periodiskt med tidvattenflödet. Diffusionskoefficienterna är därför, som tidigare visats i ekv 5.2.7 en funktion av såväl tiden som av lägeskoordinaten. I de fall då man önskar att studera masstransporten av någon substans i ett vattensystem över en längre tidsperiod, är det lämpligare att använda ett medelvärde på diffusionskoefficienterna i tiden tagen över många tidvattencykler. Att helt eliminera tidsberoendet är dock inte möjligt då diffusionskoefficienterna ofta även påverkas av vindgenererade strömmar, vilka kan variera betydligt. Eftersom diffusionskoefficienterna är funktioner av hastigheterna v' , u' , jfr ekv (4.2.10), (4.2.11) och (4.2.12), och nämnda hastigheter varierar med turbulensen, varierar diffusionskoefficienterna med vindens intensitet. Detsamma gäller för den dispersiva effekten av den vindinducerade cirkulationen. Det är därför lämpligt att inte välja tidsperioden vid medelvärdesberäkningen längre än att man får representativa värden på diffusionskoefficienterna. Vindförhållandena kan under någon årstid vara så stabila att en viss vindstyrka och vindriktning dominerar över andra och man får kanske typiska "höst- vinter- och sommarförhållanden". Man bör då beräkna flera uppsättningar av diffusionskoefficienter som var och en kan användas under deras speciella förutsättningar.



SKALA: 1:20 000.

Fig. 8.2.1 Byfjorden.

I Byfjorden utfördes under sommaren 1971 en omfattande undersökningsserie av spridningsförlopp i ytvattnet, med rodamin som spårämne [11]. Målsättningen var att studera utspädning och spridning av ett avloppsutsläpp i Byfjorden ytvatten. Det simulerade utsläppet ägde rum i fjordens inre del och på 6 meters djup, fjr fig 8.2.1. Sammanlagt utfördes 6 enskilda doseringar. Den mängd rodamin som doserades vid varje tillfälle varierades från 1,6 l till 25,0 l. Tiden under vilket utsläppen pågick varierades från 3,30 till 52,30 timmar. Koncentrationsutvecklingen i fjorden mättes från en motorbåt i vilken var monterad ett automatiskt registrerande mätinstrument. Förutom dessa kontinuerliga mätningar togs även djupprofiler av koncentrationen i diskreta punkter.

Nämnda undersökning har legat till grund för bestämning av diffusionskoefficienter i Byfjorden. För att underlätta bestämningen har beräkningsrutinen programmerats. Programmet med beskrivning är redovisat i appendix och det bygger på den i kap 5 ekv (5.3.2), härledda modellen.

Sötvattenflödet har antagits insignifikant. Den advektiva transporttermen, som ingår i modellen, har därför försumrats och dess tillskott i transportfasen har tillåtits att ingå i diffusionstermen.

Lägeskoordinater och tvärsnitt genom fjorden har lagts enl fig 8.2.1.

Substanstransporten i horisontal led sker enligt uppmätta koncentrationsprofiler i vattenskiktet ned till språngskiktets överkant. De effektivt medverkande tvärsnittsareorna har beräknats för ett djup ned till 10 meter under vattenytan och redovisas i tabell 8.2.1.

Tabell 8.2.1 Effektiva medverkande tvärsnittsareor i Byfjorden.

x	A(x) m ²	x	A(x) m ²	x	A(x) m ²
1	7500	6	12000	11	6000
2	7500	7	12000	12	10000
3	10000	8	9000		
4	12000	9	6000		
5	13000	10	1500		

Av de 6 doseringar som 1971 utfördes i Byfjorden är dosering nr 4 med åtföljande mätning av koncentrationsutvecklingen den som bedöms som mest lämplig för en bestämning av diffusionskoefficienter.

Den uppmätta medelkoncentrationen av rodamin i olika tvärsnitt av fjorden, som funktion av tiden, redovisas i fig 8.2.2, sid 197 [11]. Koncentrationsändringen i fjorden under två dygn har i fig 8.2.3 avsatts som funktion av lägeskoordinaterna. Fig 8.2.2 grundar sig på kontinuerliga mätningar och är avklingningskorrigerad medan fig 8.2.3 är medelvärden från ytan och ned till 10 m djup beräknade från uppmätta vertikalfiler och är ej avklingningskorrigerad.

Tre uppsättningar av diffusionskoefficienter har beräknats och de redovisas i fig 8.2.2.

Den första uppsättningen har beräknats utifrån koncentrationsutvecklingen den 10/7 - 15/7 se fig 8.2.2. Diffusionskoefficienterna är beräknade från dag till dag och medelvärdet av dessa beräknade i varje sektion. Denna första uppsättning är att hänföra till ett initialskede för diffusionen, då spårämnet ännu ej hunnit sprida sig i hela fjorden.

Den andra uppsättningen är på motsvarande sätt beräknad under tiden fr o m den 10/7 t o m den 18/7 -71 men med intervallet 2 dygn.

Den tredje och sista uppsättningen är beräknad utifrån fig 8.2.3 och är baserad på koncentrationsändringen i fjorden under 2 dygn fr o m den 16/7 t o m den 18/7 -71.

Tabell 8.2.2

Diffusionskoefficienter i Byfjorden

x	E_1	E_2	E_3
1	-	-	-
2	4.12	5.37	26.91
3	4.88	8.88	29.24

(Forts. tabell 8.2.2.)

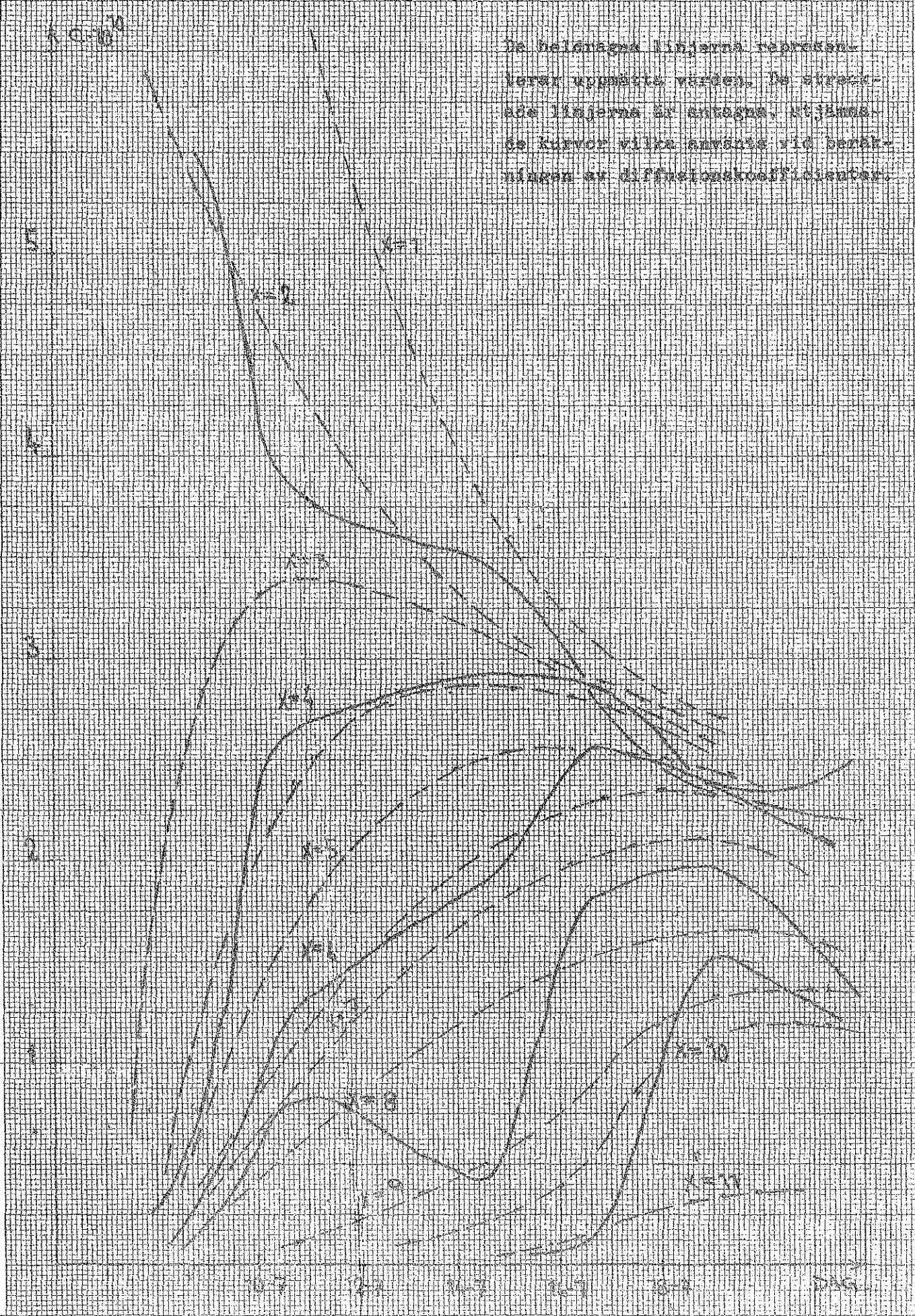
4	8.59	10.96	50.01
5	7.86	18.37	55.75
6	7.54	22.57	52.20
7	10.52	34.11	63.29
8	18.19	49.25	74.93
9	17.17	90.00	55.40
10	-	145.00	111.00

De två första uppsättningarna av diffusionskoefficienter uppvisar genomgående lägre värden än den tredje fränsett något enstaka värde, jfr tab 8.2.2. Förmodligen är de två första mera representativa då de dels är beräknade över en något längre tidsrymd dels är baserade på utjämnade medelvärden av koncentrationsutvecklingen över hela tvärsnittsarean. Den tredje uppsättningen, som är baserad på koncentrationsutvecklingen i ett fåtal djupprofiler, är mera osäker.

Fränsett små fluktuationer uppvisar dock de tre uppsättningarna en enhetlig tendens. Diffusionskoefficienterna är relativt små inne i fjorden för att successivt öka ut mot Sunninge sund. Denna tendens är vad man kan vänta då tidvattenströmmarna blir alltmer accentuerade då man inifrån fjorden närmar sig sundet. Vinden var under den aktuella perioden svag till måttlig västlig, dvs riktad in i fjorden.

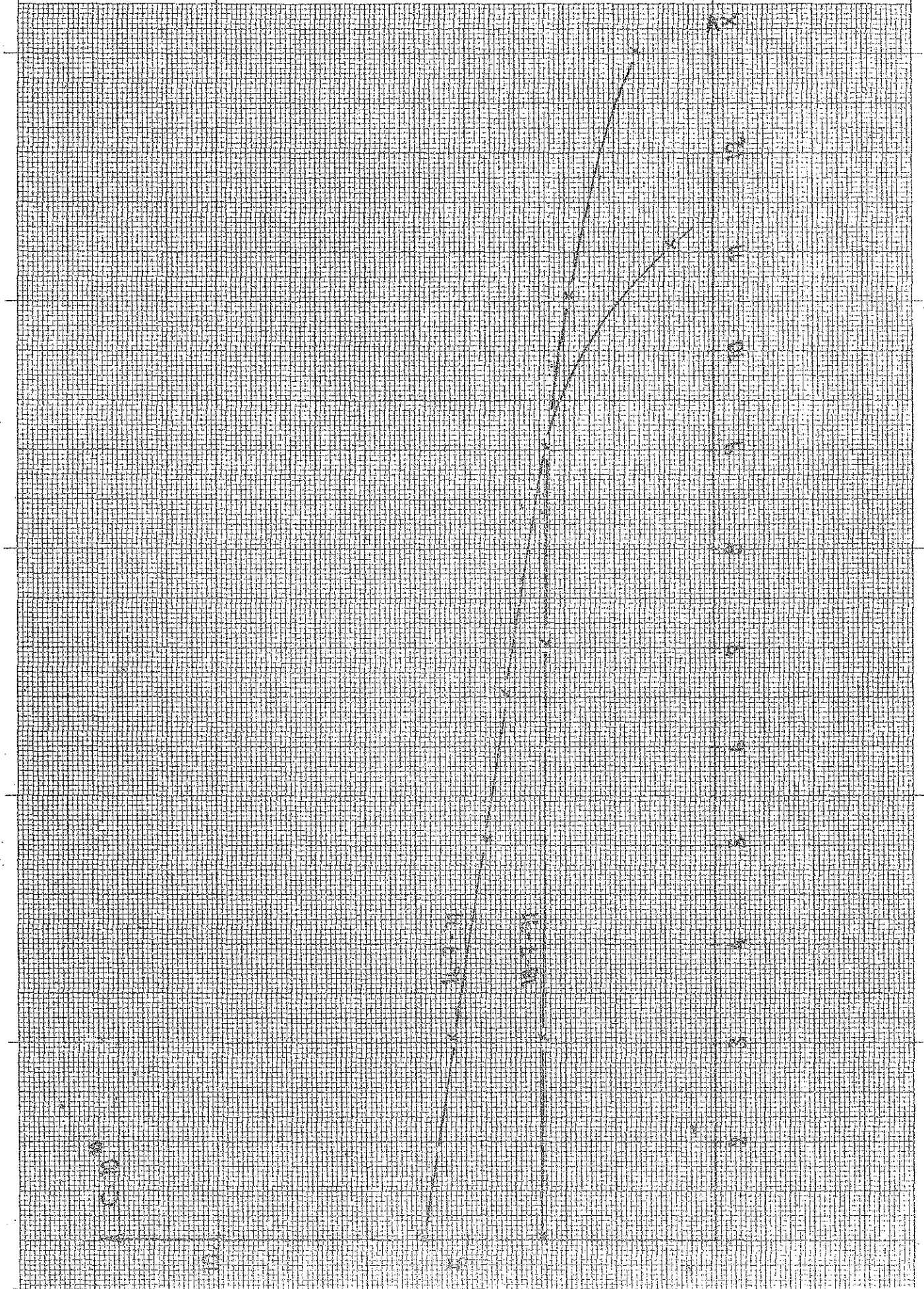
Utgående från beräknade värden i tab 8.2.2 kan man förvänta att diffusionskoefficienterna i den inre delen av fjorden varierar mellan 5-30 m²/s och i den mellersta och yttre delen 8-60 m²/s. Diffusionskoefficienten i Sunninge sund kan uppskattas till ≈ 100 m²/s. Detta kan jämföras med Oslofjorden, där diffusionskoefficienten vid tröskeln beräknats till 1 000 m²/s medan diffusionskoefficienten inne i Oslofjorden är av samma storlek som för Byfjorden eller 50 m²/s.

Fig. 8.2.2: Medelkoncentration av rodamin som funktion av tiden för dosering 4 enl. [17].



De helsträdda linjerna representerar uppmätta värden. De streckade linjerna är beräknade. De kurvor vilka avviker sig beräknningen av diffusionskoefficienten.

Fig. 8.2.3: Koncentration av rodamin
som funktion av lägeskoordinaten.



8.3 Koncentrationsberäkning för ett simulerat avloppsutsläpp

Det har uppskattats att Uddevalla kommun i framtiden behöver släppa avloppsvatten från sitt reningsverk till en mängd av 300 l/s i Byfjorden. För att beräkna koncentrationen avloppsvatten i fjorden från ett tänkt påsläpp av ett kontinuerligt avloppsflöde tills dess att stationära förhållande nåtts har diffusions- advektionsekvationen (6.2.1) använts med utgångspunkt från de diffusionskoefficienter som beräknats i föregående kapitel. Beräkningen har utförts på dator. Det använda programmet med beskrivning är redovisat i appendix.

Fjorden har indelats i element med en längd av 500 m, jfr fig 8.2.1 sid 42.

Som inre randvillkor har det i kap 6 härledda sambandet ekv (6.3.2), tillämpats. Som yttre randvillkor har valts att koncentrationen i mynningen till Havstens fjord är noll. Avloppsutsläppet har antagits ske strax innanför tvärsnitt $x = 2$, jfr fig 8.2.1 sid 42.

Det advektiva utbytet i fjorden har försumrats då effekten av den under sommarförhållandena ringa sötvattengenomströmningen inkluderats i diffusionskoefficienten.

Vid beräkningen av koncentrationsutvecklingen för ett simulerat avloppsutsläpp har det varit rimligt att koncentrera problemet till sommarhalvåret då alg- och planktonproduktionen i olika vattensystem är som rikligast. Det är också under sommaren som Byfjorden mest utnyttjas för olika fritidsaktiviteter och då olägenheterna av en ev förorening av fjorden är som mest påtagliga.

Eftersom avloppsvattnet, även vid utsläpp på 6-8 m djup, inlagras i ytan och således ej är jämnt fördelat över tvärsnittet i initialskedet, måste diffusionsmodellen användas med viss försiktighet. Om vinden är västlig, vilket är vanligast, pressas ytvattnet in i fjorden. Någonstans mellan 5 och 10 m djup uppstår en utåtriktad returström och denna cirkulation ger upphov till en nedåtriktad hastighetskomponent i inre delen av fjorden, vilket effektivt bidrar till den vertikala blandningen. I detta fall kan den endimensionella diffusionsmodellen antas vara tillämpbar. Vid ostliga vindar liksom under perioder med stor sötvattentillrinning sker däremot

en uttransport av ytlagret och däri lösta ämnen. Vertikalinblandningen försvåras i fjordens inre del av den då uppåtriktade konvektionsströmmen och en endimensionell modell kan användas endast under förutsättning att det advektiva flödet i ytskiktet medtas i modellen.

Följande beräkningar avser förhållanden sommartid vid förhärskande västliga vindar. Kortvariga ostvindperioder - något dygn - har ringa betydelse för slutresultatet vid kontinuerliga utsläpp.

Indata för koncentrationsberäkningarna redovisas på den form de erhålls från datorns radskrivare och anger tvärsnittsareor, valda diffusionskoefficienter, begynnelsekoncentrationer, källflöden, källkoncentrationer, hastigheter etc.

Beräkning nr 1.

För beräkning nr 1 har de tidigare för fjorden beräknade tvärsnittsareorna använts tillsammans med den första uppsättningen diffusionskoefficienter enl tabell 8.2.2. För Sunninge sund och för den yttre delen av Byfjorden ut mot Havstens fjord är diffusionskoefficienten inte känd. Den har, som en första ansats, valts relativt liten i sundet och sedan antagits öka ut mot Havstens fjord.

Fullständig indata redovisas på sid 51, under rubriken: "Indata för beräkning nr 1". Den inre delen av Uddevalla hamn ligger i $x = 1$, Sunninge sund i $x = 10$, jfr f ö med fig 8.2.1 sid 52.

Beräknad koncentrationsutveckling i fjorden redovisas i tabell 8.3.1 för var 30:e dag efter det att ett kontinuerligt avloppsutsläpp med 300 l/s påbörjats i segment 1. Koncentrationsprofilen längs fjorden har i fig 8.3.1 avsatts som funktion av lägeskoordinaten x , dels efter 30 dagar och dels efter att ett stationärt tillstånd uppnåtts.

Om fjorden från början är fri från avloppsvatten och om de gjorda antagandena är relevanta tar det 130 dagar innan ett stationärt tillstånd för fjorden inträder. Den beräknade koncentrationsprofilen är kontinuerligt avtagande från ett största värde i fjordens inre del till noll (randvillkor) vid mynningen, med en något ökande gradient över Sunninge sund.

Från spårämnesförsöken samt kemiska mätningar i Byfjorden kan man emellertid förvänta sig en flackare profil i fjorden och en kraftig koncentrationssänkning över sundet.

3 INDATA FÖR BERÄKNING NR 4

5 DT = 3600. DX = 500. NOD = 200
 NOS = 15 NOP = 1 AK = 0.0

9 N NDP (N)

11 1 200

15 I A(I) E(I) C(I)

17	2	7500.	4.120	0.0
19	3	15000.	4.860	0.0
21	4	12500.	8.560	0.0
23	5	13000.	7.866	0.0
25	6	14000.	7.540	0.0
27	7	12500.	10.520	0.0
29	8	10000.	18.190	0.0
31	9	6000.	17.170	0.0
33	10	1450.	18.000	0.0
35	11	10000.	28.000	0.0
37	12	8000.	40.000	0.0
39	13	9000.	50.000	0.0
41	14	6000.	60.000	0.0
43	15	12000.	70.000	0.0

33 PERIOD 1

35 I QS(I) CS(I) U(I)

37	1	0.0	0.0	0.0
39	2	300.000	3.000	0.0
41	3	0.0	0.0	0.0
43	4	0.0	0.0	0.0
45	5	0.0	0.0	0.0
47	6	0.0	0.0	0.0
49	7	0.0	0.0	0.0
51	8	0.0	0.0	0.0
53	9	0.0	0.0	0.0
55	10	0.0	0.0	0.0
57	11	0.0	0.0	0.0
59	12	0.0	0.0	0.0
61	13	0.0	0.0	0.0
63	14	0.0	0.0	0.0
65	15	0.0	0.0	0.0

53 I = 10 Z2 = 2.161

55 DT HALVERAD = 1800.

57 I = 10 Z2 = 1.081

59 DT HALVERAD = 900.

61

63

65

67

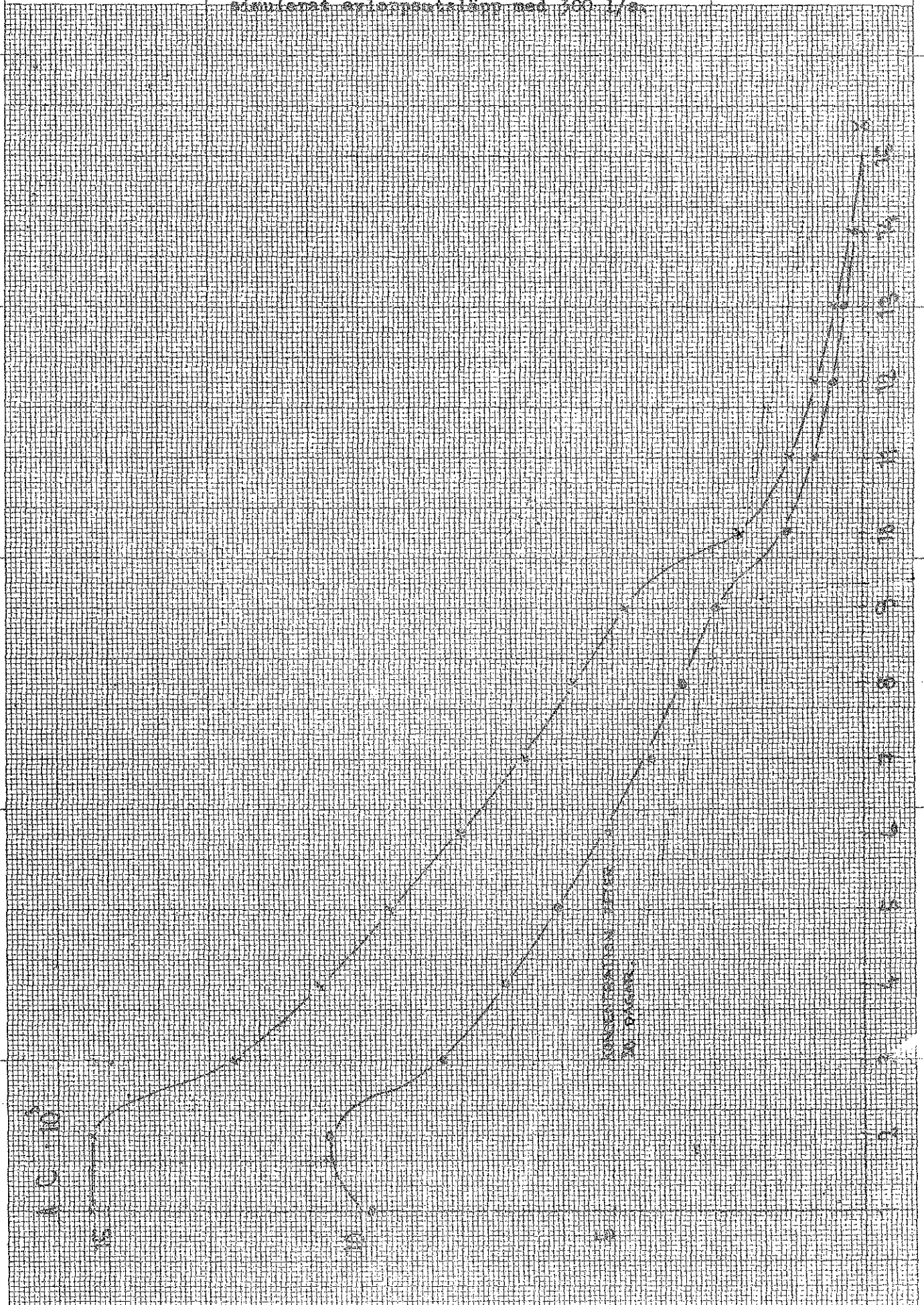
69

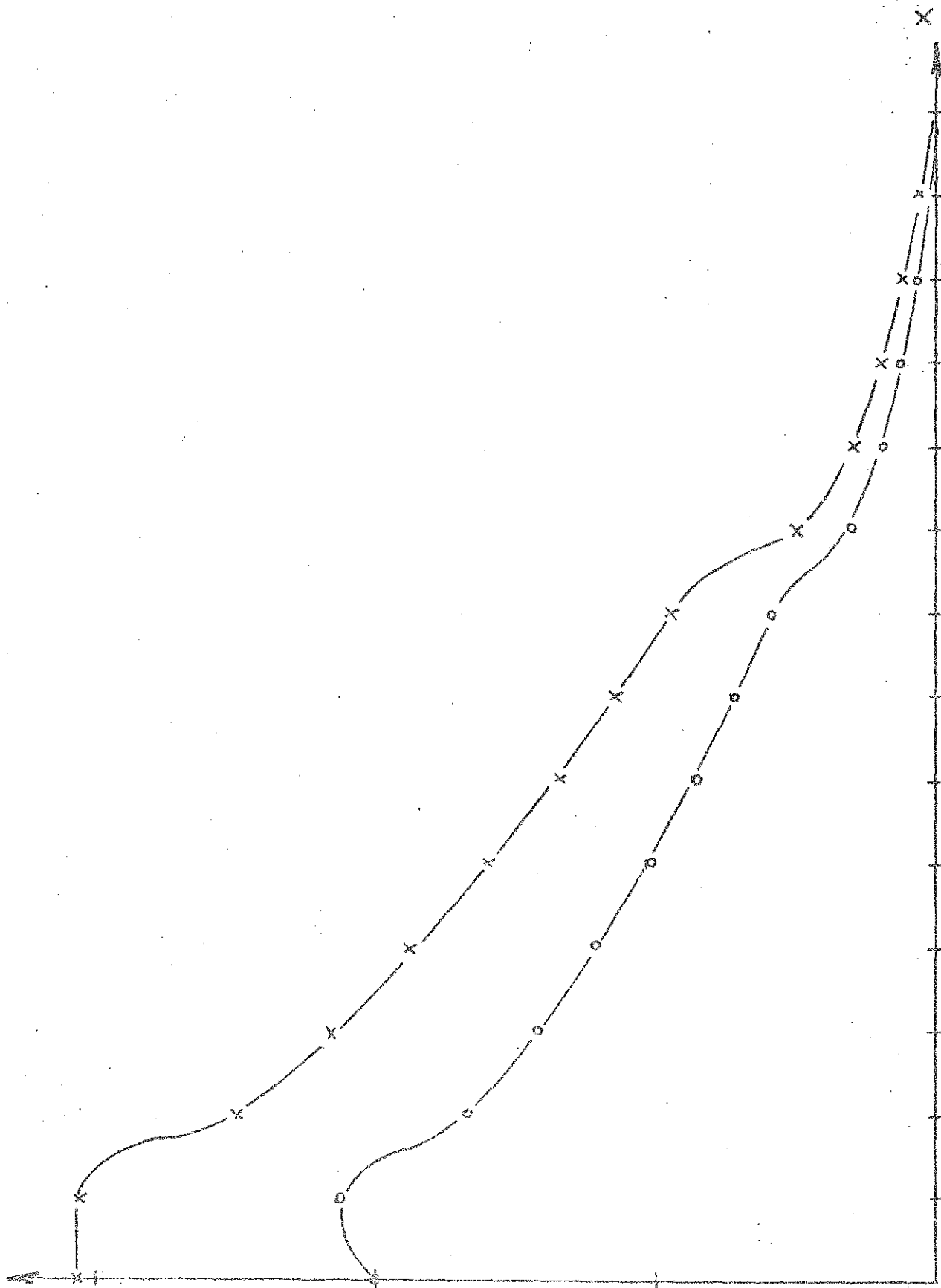
Tabell 8.3.1 : Beräkning nr 1.

Koncentrationsutveckling i Byfjorden för ett simulerat avlopps-
utsläpp med 300 l/s.

x	30	60	90	120	150	dagar
1	9.77	13.43	14.76	15.24	15.32	
2	10.66	13.76	14.88	15.28	15.35	
3	8.37	11.09	12.07	12.43	12.49	
4	7.12	9.58	10.46	10.78	10.84	
5	6.09	8.29	9.08	9.37	9.42	
6	5.09	7.00	7.70	7.95	7.99	
7	4.25	5.89	6.49	6.70	6.74	
8	3.63	5.06	5.57	5.76	5.79	
9	2.97	4.15	4.57	4.73	4.75	
10	1.53	2.14	2.36	2.44	2.46	
11	0.93	1.30	1.43	1.48	1.49	
12	0.62	0.87	0.96	0.99	1.00	
13	0.38	0.53	0.59	0.61	0.61	
14	0.15	0.21	0.24	0.25	0.25	
15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	

Fig. 8.3.1 : Koncentrationsprofil i By-
fjorden vid stationärt tillstånd för ett
simulerat avloppsläpp med 300 l/s.





Beräkning nr 2.

I förhållande till beräkning nr 1 har tvärsnittsareorna i fjorden minskats något och dessutom utjämnats i förhållande till varandra.

Diffusionskoefficienten för Sunninge sund har behållits från beräkning nr 1 men ökats något inne i fjorden och minskats utanför sundet. Fullständig indata redovisas på sid 56 , under rubriken: "Indata för beräkning nr 2".

Som väntat fördröjs uttransporten av avloppsvatten jämfört med beräkning nr 1. Det dröjer nu 195 dagar, mot för beräkning nr 1, 130 dagar för att ett stationärt tillstånd skall uppträda i fjorden. Den slutliga koncentrationen blir också högre, jfr tabell 8.3.2 sid 57 samt fig 8.3.2.

Dessa båda effekter beror främst på att den antagna medverkande arean för tvärsnitt $x = 11$ har minskats med 40 %, från 1 000 till 600 m^2 samt att diffusionskoefficienten i samma snitt minskats med 11 %, från 28 till 25 m^2/s . Produkten, arean \cdot diffusionskoefficienten har sålunda minskats med 46 % för nämnda tvärsnitt. Denna relativt stora förändring av parametern $A \cdot E$ för ett enstaka tvärsnitt ger här endast en ändring i maximala slutkoncentrationen från 15,35 ‰ till 15,91 ‰ eller med 3,5 %. Modellen är således relativt okänslig för förändringar av enstaka parametervärden, $A \cdot E$.

Koncentrationen är även denna gång kontinuerligt avtagande i fjordens längdriktning, med en svag ökning av gradienten i sundet. Koncentrationsgradienten utanför sundet har ökat i förhållande till beräkning 1.

INDATA FÖR BERÄKNING NR 2

CT = 3600.
NCS = 15

DX = 500.
NDP = 1

NOD = 200
AK = 0.0

N NDP(N)
1 200

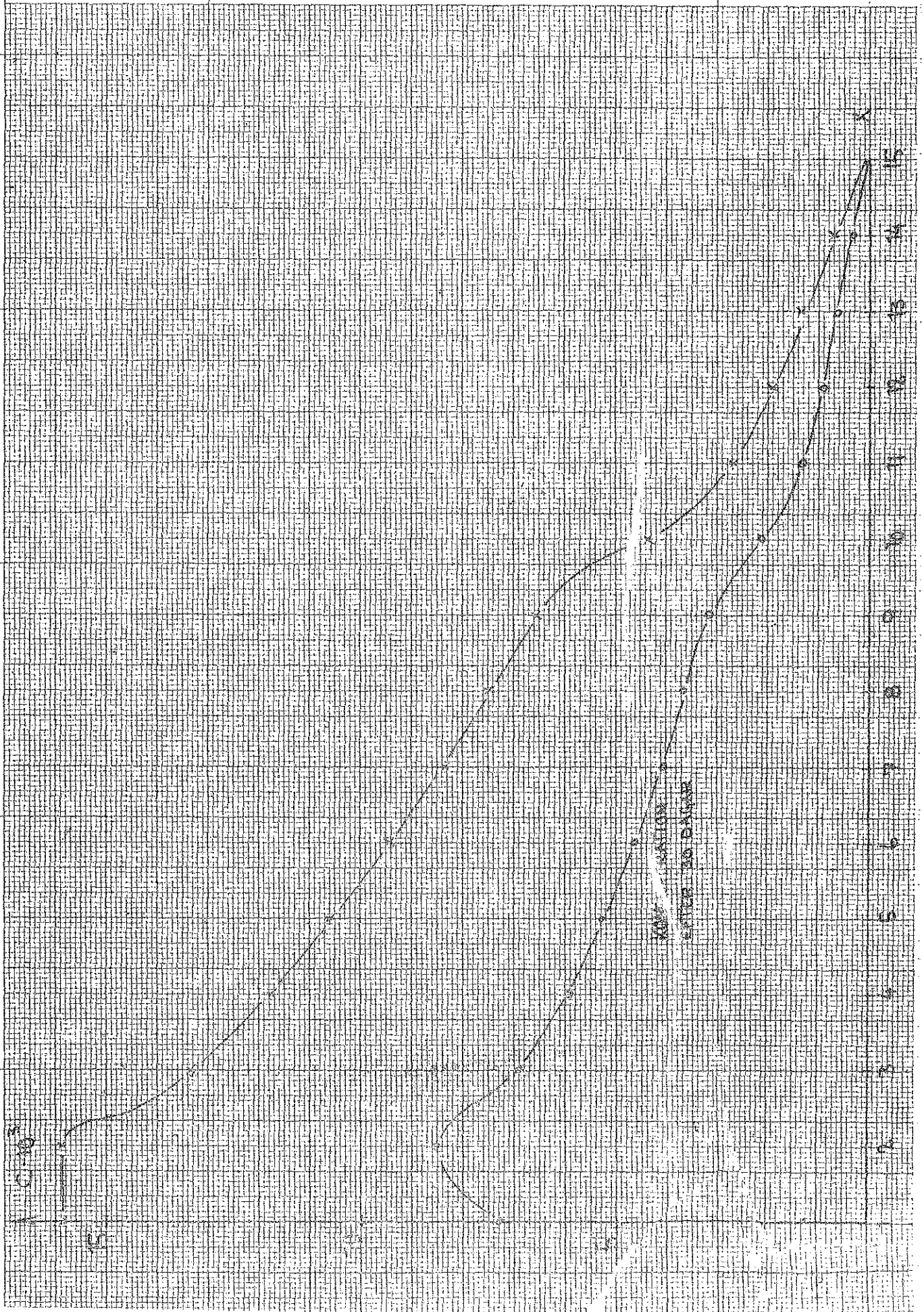
I	A(I)	E(I)	C(I)
1	7500.	5.000	0.0
2	7500.	6.000	0.0
3	10000.	7.000	0.0
4	12000.	10.000	0.0
5	13000.	10.000	0.0
6	12000.	10.000	0.0
7	12000.	13.000	0.0
8	9000.	22.000	0.0
9	6000.	18.000	0.0
10	1500.	18.000	0.0
11	6000.	25.000	0.0
12	8000.	30.000	0.0
13	9000.	30.000	0.0
14	6000.	30.000	0.0
15	8000.	30.000	0.0

PERIOD 1

I	QS(I)	CS(I)	U(I)
1	0.0	0.0	0.0
2	300.000	1.000	0.0
3	0.0	0.0	0.0
4	0.0	0.0	0.0
5	0.0	0.0	0.0
6	0.0	0.0	0.0
7	0.0	0.0	0.0
8	0.0	0.0	0.0
9	0.0	0.0	0.0
10	0.0	0.0	0.0
11	0.0	0.0	0.0
12	0.0	0.0	0.0
13	0.0	0.0	0.0
14	0.0	0.0	0.0
15	0.0	0.0	0.0

I = 10 Z2 = 1.498
DT HALVERAD = 1800.

Fig. 8.3.2: Koncentrationsprofil i Byfjorden vid stationärt tillstånd för ett simulerat avloppsutsläpp med 300 l/s.



Beräkning nr 3

För att bättre anpassa modellen till verkliga förhållanden har arean i tvärsnitten på ömse sidor om sundet valts relativt små. Detta för att effekten av den plötsliga minskningen av arean i sundet skall slå igenom i beräkningsmodellen. Diffusionskoefficienterna har ökats, speciellt i sundet, och överensstämmer närmast med den beräknade uppsättningen E_2 .

Indata redovisas på sid 60, under rubriken: "Indata för beräkning nr 3".

Denna beräkning ger att koncentrationsutvecklingen går betydligt fortare till ett stationärt tillstånd och att slutkoncentrationen inne i fjorden blir väsentligt lägre än för beräkning nr 1 och 2, se tabell 8.3.3 och fig 8.3.3 sid 61 och 62 resp. Orsaken är att de större diffusionskoefficienterna ger en bättre spridning och en snabbare uttransport av avloppsvatten genom fjorden.

Koncentrationsgradienten inne i fjorden är också mindre än i tidigare fall, vilket troligen bättre överensstämmer med verkliga förhållande.

INDATA FÖR BERÄKNING NR 3

DT = 3600.
NOS = 15

DX = 500.
NOP = 1

NOD = 300
AK = 0.0

N NDP(N)
1 300

I	A(I)	E(I)	C(I)
1	7500.	10.000	0.0
2	7500.	10.000	0.0
3	10000.	10.000	0.0
4	12000.	20.000	0.0
5	13000.	20.000	0.0
6	12000.	20.000	0.0
7	12000.	30.000	0.0
8	9000.	30.000	0.0
9	3000.	30.000	0.0
10	1500.	100.000	0.0
11	3000.	40.000	0.0
12	8000.	50.000	0.0
13	8000.	60.000	0.0
14	8000.	70.000	0.0
15	8000.	80.000	0.0

PERIOD 1

I	QS(I)	CS(I)	U(I)
1	0.0	0.0	0.0
2	300.000	1.000	0.0
3	0.0	0.0	0.0
4	0.0	0.0	0.0
5	0.0	0.0	0.0
6	0.0	0.0	0.0
7	0.0	0.0	0.0
8	0.0	0.0	0.0
9	0.0	0.0	0.0
10	0.0	0.0	0.0
11	0.0	0.0	0.0
12	0.0	0.0	0.0
13	0.0	0.0	0.0
14	0.0	0.0	0.0
15	0.0	0.0	0.0

I = 9 Z2 = 1.440
DT HALVERAD = 1800.

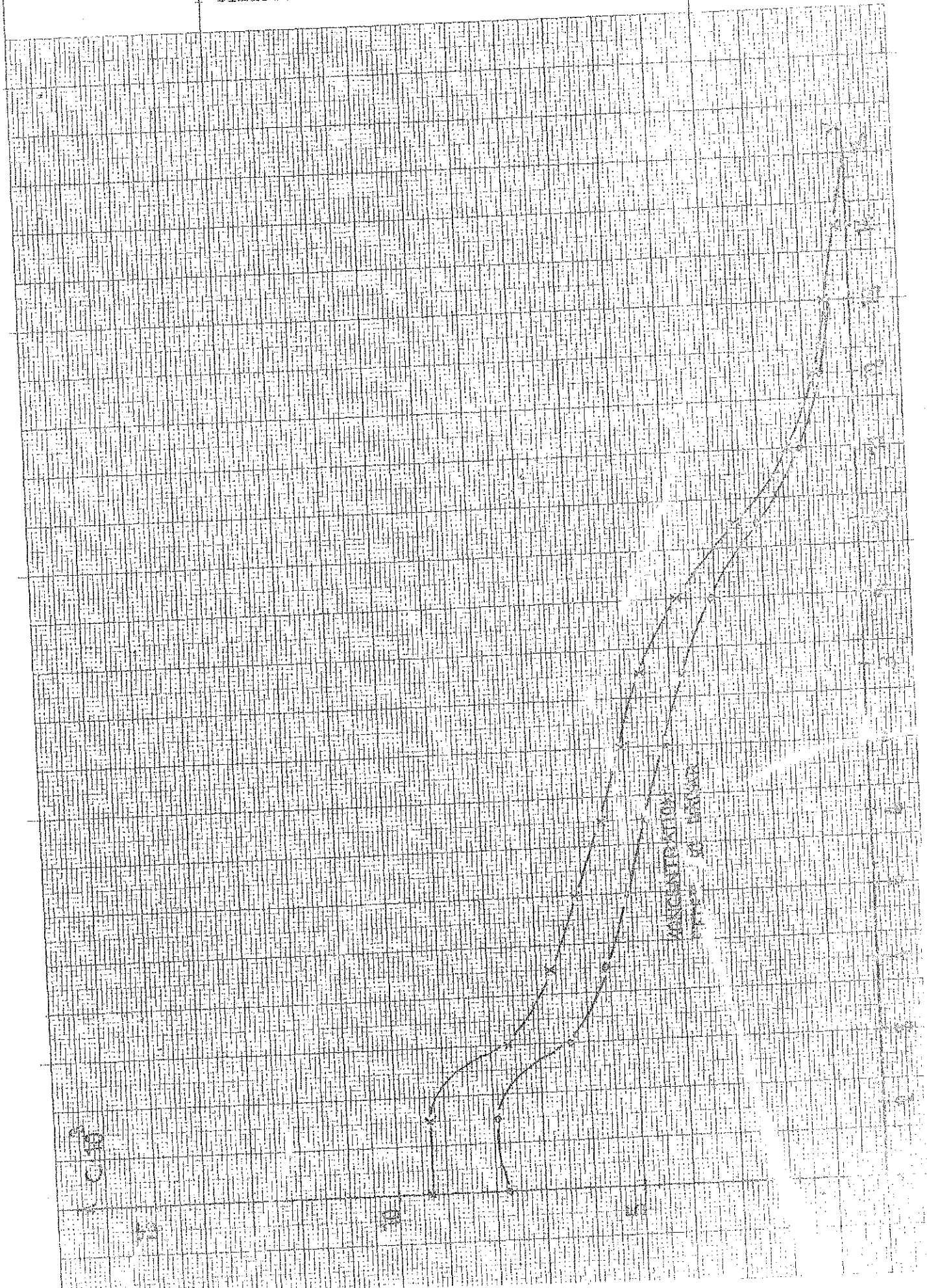
I = 10 Z2 = 1.224
DT HALVERAD = 900.

Tabell 8.3.3: Beräkning nr 3.

Koncentrationsutveckling i Byfjorden för ett simulerat avloppsutsläpp med 300 l/s.

x	30	60	80 dagar
1	7.74	9.13	9.33
2	7.93	9.16	9.34
3	6.39	7.47	7.63
4	5.61	6.61	6.76
5	5.09	6.02	6.16
6	4.58	5.44	5.57
7	4.16	4.96	5.07
8	3.77	4.49	4.60
9	3.09	3.69	3.78
10	2.08	2.48	2.54
11	1.18	1.41	1.44
12	0.71	0.85	0.87
13	0.43	0.52	0.53
14	0.20	0.24	0.25
15	0.00	0.00	0.00

Fig. 8.3.3: Koncentrationsprofil i By-
fjorden vid stationärt tillstånd för ett
simulerat avloppsutsläpp med 300 l/s.



Beräkning nr 4.

Areorna från föregående beräkning har behållits oförändrade.

Diffusionskoefficienten i Sunninge sund har minskats från 100 till 30 m²/s. Vidare har diffusionskoefficienterna inne i fjorden minskats något medan de övriga i stort sett bibehållits från beräkning nr 3.

Indata redovisas på sid 64 , under rubriken: "Indata för beräkning nr 4".

Ovanstående ändringar av diffusionskoefficienterna medför att maximala slutkoncentrationen inne i fjorden ökar med 35 % och tiden för att uppnå stationärt tillstånd ökar med 38 % i förhållande till beräkning nr 3. Koncentrationsutvecklingen redovisas i tabell 8.3.4 och i fig 8.3.4 sid 65 och 66 resp. Koncentrationsreduktionen över sundet blir här kraftig.

INDATA FÖR BERÄKNING NR 4

DT = 1800. DX = 500. NOD = 300
 NCS = 15 NOP = 1 AK = 0.0

N	NDP(N)		
1	300		

I	A(I)	E(I)	C(I)
1	7500.	10.000	0.0
2	7500.	10.000	0.0
3	10000.	10.000	0.0
4	12000.	15.000	0.0
5	13000.	15.000	0.0
6	12000.	15.000	0.0
7	12000.	20.000	0.0
8	9000.	22.000	0.0
9	3000.	25.000	0.0
10	1500.	30.000	0.0
11	3000.	40.000	0.0
12	8000.	50.000	0.0
13	8000.	60.000	0.0
14	8000.	70.000	0.0
15	8000.	70.000	0.0

PERIOD 1

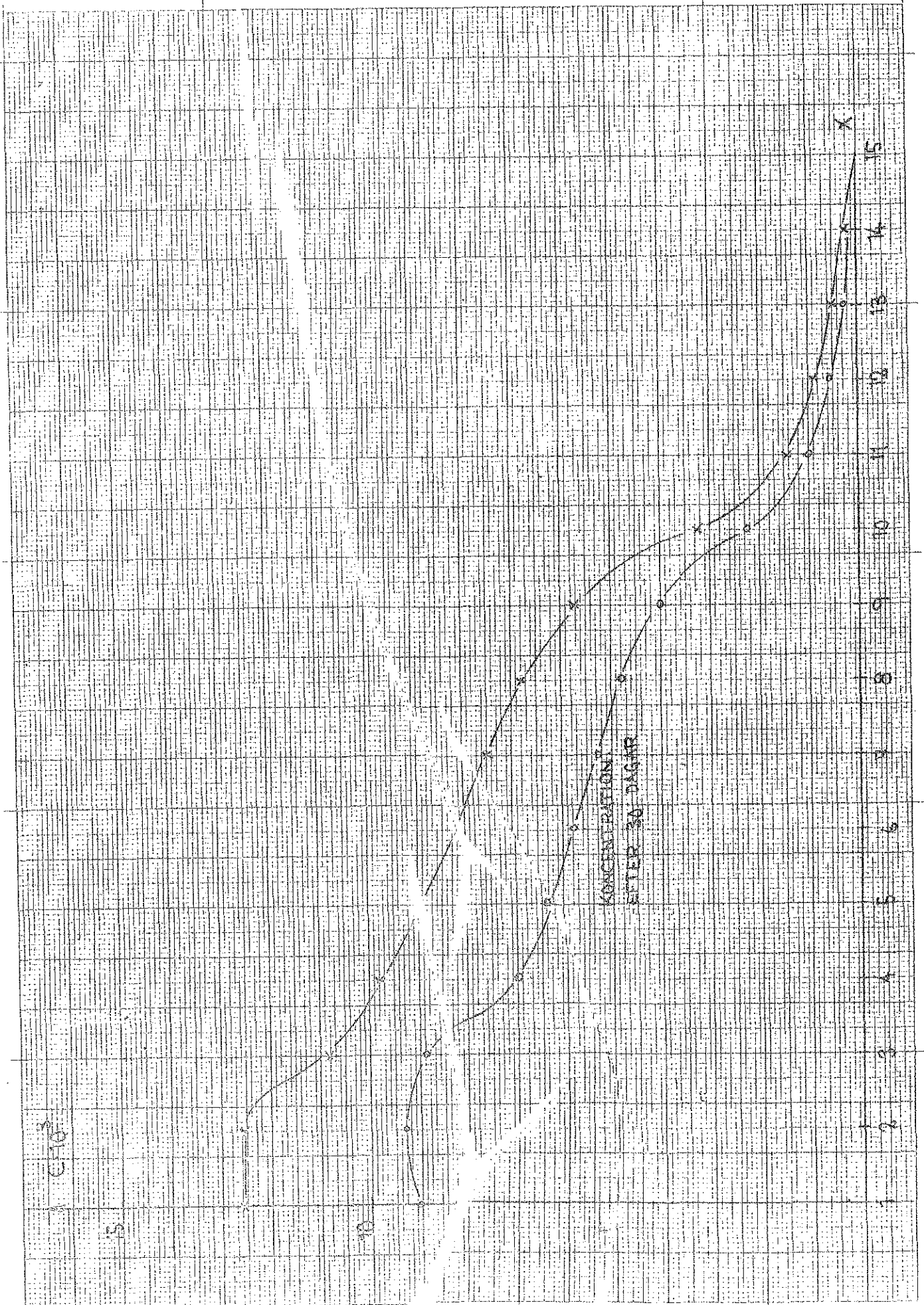
I	QS(I)	CS(I)	U(I)
1	0.0	0.0	0.0
2	300.000	1.000	0.0
3	0.0	0.0	0.0
4	0.0	0.0	0.0
5	0.0	0.0	0.0
6	0.0	0.0	0.0
7	0.0	0.0	0.0
8	0.0	0.0	0.0
9	0.0	0.0	0.0
10	0.0	0.0	0.0
11	0.0	0.0	0.0
12	0.0	0.0	0.0
13	0.0	0.0	0.0
14	0.0	0.0	0.0
15	0.0	0.0	0.0

Tabell 8.3.4: Beräkning nr 4.

Koncentrationsutveckling i Byfjorden för ett simulerat
avloppsutsläpp med 300 l/s.

x	30	60	90	110 dagar
1	9.05	11.63	12.37	12.54
2	9.33	11.71	12.40	12.55
3	7.89	10.08	10.71	10.85
4	7.02	9.06	9.65	9.79
5	6.39	8.31	8.87	8.99
6	5.78	7.57	8.08	8.20
7	5.26	6.91	7.38	7.49
8	4.77	6.28	6.71	6.81
9	4.00	5.28	5.64	5.73
10	2.27	3.00	3.21	3.26
11	1.02	1.34	1.44	1.46
12	0.62	0.82	0.87	0.89
13	0.38	0.51	0.54	0.55
14	0.18	0.24	0.26	0.26
15	0.00	0.00	0.00	0.00

Fig. 8.3.4: Koncentrationsprofil i Byfjorden vid stationärt tillstånd för ett simulerat avloppsutsläpp med 300 l/s.



8.4 Sammanfattning av beräkningsresultaten

Effektivt medverkande areor och diffusionskoefficienter är de två parametrar som huvudsakligen styr beräknad koncentrationsutveckling och bestämmer vilka koncentrationer som kan påräknas vid ett uppnått stationärt tillstånd. Förutsättningen för att den tillämpade diffusionsadvektions-ekvationen skall ge en lösning som speglar verkliga förhållanden är således avhängig av att beräknad eller uppskattad indata är relevant.

Måttliga fel i enstaka areor eller diffusionskoefficienter har dock ringa betydelse på beräkningsresultaten.

I diffusionsförloppet medverkande areor är relativt lätta att bestämma till skillnad mot diffusionskoefficienterna, som kan variera inom vida gränser; i Oslofjorden 50 - 1 000 m²/s och för Byfjorden 5 - 200 m²/s där de högsta värdena är att hänföra till tröskeln för respektive fjord.

Höga värden på diffusionskoefficienterna betyder en snabb spridning och en snabb uttransport av avloppsvatten. En förändring i diffusionskoefficienterna i ett begränsat avsnitt får då en omedelbar effekt på hela systemet. Låga värden betyder en långsam spridning och en långsam uttransport av avloppsvatten. En förändring av diffusionskoefficienterna i ett begränsat avsnitt slår här igenom mycket långsamt; systemet är trögt. Om man för ett långsträckt, halvslutet vattensystem som Byfjorden, förutsätter små diffusionskoefficienter i de inre delarna och att de ökar kraftigt ut mot den öppna delen medför ett avloppsutsläpp i den inre delen att man här får en hög koncentration med en kraftig gradient längs fjorden. Beräkning nr 1 och nr 2 illustrerar detta. Tiden för att uppnå stationärt tillstånd är här 130 resp 195 dagar och maximalkoncentrationerna 15,35 % resp 15,91 %. Beräkning nr 3 och nr 4, som förutsätter högre värden på diffusionskoefficienterna, ger en annan bild av koncentrationsutvecklingen. Det dröjer 80 resp 110 dagar innan stationärt tillstånd inträder. Slutkoncentrationerna inne i fjorden blir väsentligt lägre 9,34 % resp 12,55 %. Koncentrationsgradienten blir liten inne i fjorden men ökar kraftigt över Sunninge sund. Spridningsundersökningar med spårämnen, som gjorts i Byfjorden av Institutionen för vattenbyggnad, CTH, visar att

inne i fjorden blir koncentrationsgradienten relativt liten. Detta antyder att diffusionskoefficienterna här är relativt stora. Vidare har fältförsöken visat att det uppstår en kraftig gradient över Sunninge sund och att koncentrationerna utanför sundet blir relativt små.

Vid en jämförelse visar speciellt beräkning nr 3 en god överensstämmelse med fältförsöken.

REFERENSER

1. Björk, Å och Dahlquist G. : Numeriska metoder:
Gleerups Bokförlag, Sund, 1969.
2. Carslaw, H.S. and Jaeger J.C. : Conduction of Heat in Solids.
Claredon Press, Oxford, 1959.
3. Cederwall, K. och Sjöberg A. : Hydraulik del 1. Chalmers
Tekn Högskola, Inst. för vattenbyggnad, Intern skrift
nr 6. Göteborg 1969.
4. Fröberg, C-E. : Lärobok i numerisk analys. Scandinavian
University Books. 1962.
5. Glenne, B. : Diffusive Processes in Estuaries. Sanit., Eng. Res.
Lab. College of Eng. and School of Pub. Health Univ. of
Calif. Berkely. Serl. Rep. No. 66-6, Sept. 1966.
6. Göransson, C-G. och Svensson T. : Byfjordsundersökningen 1971,
Vattenomsättningen, Underrättelse: Proj. 7-77/71
Chalmers Tekn Högskola, Göteborg.
7. Harleman D. R. F, Lee C-L, and Hall L. : Numerical Studies of
Unsteady Dispersion in Estuaries.
Journal of the Sanitary Engineering Division, ASCE, SA 5,
October, 1968.
8. Leendertse, J. J. and Gritton E. C. : A Waterquality Simulation
Model for Well Mixed Estuaries and Coastal Seas. Vol.
III, Jamaica Bay Simulaion. The Rand Corporation, R-
709-NYC July 1971.
9. Leendertse, J. J. and Gritton E. C. : A Waterquality Simulation
Model for Well Mixed Estuaries and Coastal Seas: Vol. II
Computation Procedures. The Rand Corporation, R-708-
NYC, July 1971.

10. Leendertse, J. J.: A Water-Quality Simulation Model for Well-Mixed Estuaries and Coastal Seas.
Vol. I, Principles of Computation. The Rand Corporation, RM-6230-RC, February 1970.
11. Lewin, A., Lindgren A. och Sjöström H.: Simulering av avloppsutsläpp i Byfjordens ytvattenskikt.
Examensarbete i vattenbyggnad 1971:5. Chalmers Tekn. Högskola, Göteborg.
12. O'Connor, D. J.: Estuarine Distributions of Nonconservative Substances. Journal of the Sanitary Engineering Division, ASCE, Vol. 91, No. SA 1, February 1965.
13. Price, H. S., Cawendish J. C. and Varga R. S.: Numerical Methods of Higher-Order Accuracy for Diffusion-Convection Equations. Journal of Soc. of Petr. Engrs. Vol. 8, No. 3, Sept. 1960.
14. Rhode, S.: Numerical Methods in Fluid Dynamics. Genese, February 1972
15. Richtmyer, R. D. and Morton, K. W.: Difference Methods for Initial-Value Problems.
Interscience Publishers, New York, London, Sidney, 1967.
16. Richtmyer, R. D.: Difference Methods for Initial-Value Problems.
Interscience Publishers, New York, London, 1957.
17. Siemons, J.: Numerical Methods for the Solution of Diffusion-Advection Equations. Delft Hydraulics Laboratory,
Publ. No. 88, December 1970.
18. Stone, H. L. and Brian, P. L. T.: Numerical Solution of Convective Transport Problems. A. J. Ch. E. Journal, Vol. 9,
pp. 681-688, 1963.

19. Al-Saffar, A. M.: Eddy Diffusion and Mass Transfer in Open Channel Flow. Ph. D. Dissertation. Civil Eng. Dept., Univ. of Calif. , Berkely, 1964.
20. Shih-J. Pai: Viscous Flow Theory. Vol. II Turbulent Flow, Institute for Fluid Dynamics and Applied Mathematics, University of Maryland. 1957.

APPENDIX

Beteckningar

A(I)	=	Tvårsnittsarea i sektion I
AK	=	Avklingningskonstant
C (I)	=	Koncentration i sektion I
C (I, J)	=	" " vid tidpunkt J
CS (I)	=	Källkoncentration i sektion I
DT	=	Tidsintervallens längd
DX	=	Steglängd
E(I)	=	Diffusionskoefficienter
ID	=	Tidsintervall mellan utskrifter, i dagar
NOD	=	Totala antalet dagar
NDP	=	Antal dagar i period N
NOP	=	Antal perioder
NOS	=	Antal sektioner
QS(I)	=	Källflöde
R	=	Källterm
U(I)	=	Strömhastighet
Z	=	Mått på stationärt tillstånd

PROGRAMBESKRIVNING

Programmen är skrivna i språket Fortran IV.

1. Diffusions- advektionsekvationen i en dimension

Allmänt

Programmet beräknar koncentrationsutveckling i maximalt 49 segment för upp till 10 olika tidsperioder med ett godtyckligt antal dagar i varje period.

Med tidsperiod definieras en period under vilken indata i form av källtermer, källkoncentrationer och strömhastigheter är konstanta. Då tidsperioden är slut eller ett stationärt tillstånd inträtt växlar programmet till nästa period.

Stationärt tillstånd definieras av att koncentrationsändringen under en månad är mindre än en promille varvid beräkningsrutinen bryts eller går över till en ny period.

Programmet utnyttjar konstant längdsteg DX. Tidsintervallet DT kan i princip väljas oberoende av DX. Om beräkningsintervallet DT valts för långt, så att numerisk instabilitet skulle uppkomma, halveras beräkningsintervallets längd DT automatiskt.

Indata

Vattensystemet indelas i ett antal lika långa segment skilda åt i tvärsektion $x = 1, 2, 3, \dots$. Antal tvärsektioner (NOS) = antal segment +1.

Vattensystemet innesluts således mellan sektionerna $x = 1$ och $x = \text{NOS}$

All indata refererar till tvärsnittet $x \in \{1, \text{NOS}\}$, och stansas på hålkort.

Utdata

Utmatning sker på radskrivare. All inläst, samt av programmet konverterad indata, skrivs ut.

Koncentrationsutvecklingen för vattensystemet erhålls för varje tvärsektion.

Tidsintervall mellan utskrifter anges i hela dagar.

Stansning av indata

Kort, Positioner, Parametrar och deras format.

<u>1,</u>	1 - 10 ;	DT	F-Format
	11 - 20 ;	DX	F- "
	21 - 25 ;	NOD	I - "
	26 - 30 ;	NOS	I - "
	31 - 40 ;	AK	E - "
	41 - 45 ;	ID	I - "

<u>2,</u>	1 - 10 ;	A(1)	F- "
	11 - 20 ;	A(2)	F- "
	o s v		

<u>,</u>	1 - 10 ;	E(1)	F- "
	11 - 20 ;	E(2)	F- "
	o s v		

<u>,</u>	1 - 5 ;	NOP	I - "
	5 - 10 ;	NDP(1)	I - "
	11 - 15 ;	NDP(2)	I - "
	o s v		

<u>,</u>	1 - 10 ;	C(1)	F- "
	11 - 20 ;	C(2)	F- "
	o s v		

Kort, Positioner, Parametrar och deras format.

—,	1 - 10 ;	U(1, 1)	E- Format
	11 - 12 ;	U(2, 1)	E- "
	- ;	-	E- "
	- ;	-	E- "
	- ;	-	E- "
	- ;	U(1, 2)	E- "
	- ;	U(2, 2)	E- "
	-	-	-
	o s v		

—,	1 - 10 ;	QS(1, 1)	F- Format
	11 - 20 ;	CS(1, 1)	F- "
	21 - 30 ;	QS(2, 1)	F- "
	31 - 40 ;	CS (2, 1)	F- "
	-	-	-
	o s v		

```

C     NUMERISK LÖSNING AV DIFFUSION-ADVEKTIONSEKVATIONEN I EN DIMENSION
C
C
C     EKVATION:  $D/DX(A * E * (DC/DX)) = D/DX(A * U * C) - R + A * (DC/DT)$ 
C
C     A(I) = TVÄRSNITTSAREAN I SEKTION I
C     AK = AVKLINGNINGSKONSTANT
C     C(I) = KONCENTRATIONEN (STARTVILLKOR)
C     DX = STEGLÄNGD I X-LED
C     DT = STEGLÄNGD I TID
C     E(I) = DIFFUSIONSKOEFFICIENTER
C     U(I) = STRÖMHASTIGHET
C     NOS = ANTAL TVÄRSEKTIONER
C     NOP = ANTAL PERIODER
C     NDP = ANTAL DAGAR I PERIOD N
C     NCD = TOTALA ANTALET DAGAR
C     QS(I) = KÄLLFLÖDE
C     CS(I) = KÄLLKONCENTRATION
C     CSS(I) = C(I)? KONTROLL FÖR STATIONÄRT TILLSTÄND
C     R = KÄLLA
C
C     DIMENSION A(50), C(50), CS(50,10), CSS(50), E(50), NDP(10)
C     , QS(50,10), U(50,10)
C     DATA CSS/50*0.0/
C     READ(5,15) DT,DX,NCD,NOS,AK,10
C     READ(5,20) (A(I),I=1,NOS)
C     READ(5,26) (E(I),I=1,NOS)
C     READ(5,25) NOP,(NDP(N),N=1,NOP)
C     LÄS IN BEGYNNELSEVÄRDEN
C     READ(5,26) (C(I),I=1,NOS)
C     LÄS IN DE VÄRDEN SOM ÄR KONSTANTA I PERIOD N
C     READ(5,28) ((U(I,N),I=1,NOS),N=1,NOP)
C     READ(5,26) ((QS(I,N),CS(I,N),I=1,NOS),N=1,NOP)
15  FORMAT(2F10.0,2I5,E10.3,I5)
20  FORMAT(8F10.0)
25  FORMAT(16I5)
26  FORMAT(8F10.3)
27  FORMAT(1E10.3)
28  FORMAT(8E10.4)
    WRITE(6,30) DT,DX,NCD,NOS,NOP,AK
30  FORMAT(1H1,6HNDATA/1H0,4HDT =,F10.0,10X,4HDX =,F10.0,
&10X,5HNOD =,I5/1X,5HNOS =,I8,11X,5HNOP =,I8,11X,4HAK =,E10.3)
    WRITE(6,31)
31  FORMAT(/1H0,2H N,6X,6HNOP(N)/)
    K=12
    DO 33 I=1,NOP
    WRITE(6,32) I,NDP(I)
32  FORMAT(1X,I2,7X,I5)
    K=K+1
33  CONTINUE
    WRITE(6,34)
34  FORMAT(1H-,2H I,8X,4HA(I),8X,4HE(I),8X,4HC(I)/)
    K=K+3
    DO 37 I=1,NOS
    WRITE(6,35) I,A(I),E(I),C(I)
35  FORMAT(1X,I2,2X,F10.0,2X,F10.3,2X,F10.3)
    K=K+1
    IF(K-63)37,37,36
36  WRITE(6,122)
    WRITE(6,34)

```

```

K=6
37 CONTINUE
DO 42 I=1,NOP
WRITE(6,38) N
K=K+7
38 FORMAT(1H-,7HPERIOD , I2/10(1H*)/1X, 2H I, 7X, 5HQ5(I), 7X,
&5HCS(I), 8X, 4HU(I) /)
CO 42 I=1,NOS
WRITE(6,39) I, QS(I,N), CS(I,N), U(I,N)
39 FORMAT(1X, I2, 2X, F10.3, 2X, F10.3, 2X, F10.4)
I=K+1
IF(K-63)42,42,40
40 WRITE(6,122)
WRITE(6,38)
K=9
42 CONTINUE
C HJÄLPKONSTANTER
Z=0.0001
JA=0
VM=(A(1)+A(2))*(E(1)+E(2))/4.0*DX
EM=(A(1)+A(2))*DX/4.0*DT
SM=(A(1)+A(2))/8.0
CM=VM+EM
GM=SM*(U(1,1)+U(2,1))
CM=QS(1,1)*CS(1,1)*DX/2.0
IC=NCS/10
IF(IC*10. NE. NOS) IC=IC+1
IB=2*IC+4
C TESTA STABILITETEN
MS=NCS-1
43 DO 44 I=2,MS
Z1=(A(I+1)*E(I+1)+2*A(I)*E(I)+A(I-1)*E(I-1))/2
Z2=Z1*DT/(A(I)*DX*DX)
IF(Z2-1.0)44,45,45
44 CONTINUE
Z=0.55E-07*DT
GO TO 52
45 DT=DT/2.0
K=K+4
IF(K.LT.63)GO TO 47
WRITE(6,122)
K=4
47 WRITE(6,50)I, Z2, DT
50 FORMAT(/1H0,3HI =, I3, 5X, 4HZ2 =, F10.3/ 1X, 12HDT HALVERAD=, F10.0)
GO TO 43
C BERÄKNA ANTAL INTERVALL PER DAG
52 JD=86400/DT
C BERÄKNA TOTALA ANTALET INTERVALL
JTOT=JD*NOD
C J=TIDSINTERVALL, JK=TIDSINTERVALL INOM DAG,
C &N=TIDSPERIOD, JM=DAG I PERIOD
J=1
JK=1
JM=1
N=1
WRITE(6,58)
58 FORMAT(1H1,41HBERÄKNAD KONCENTRATIONSUTVECKLING C(I,J)/1X,
&41(1H*)//1X, 30HC=KONCENTRATIONEN I=SEKTION/1X,
&44HJ=TIDSINTERVALL JK=TIDSINTERVALL INOM DAG/
&1X, 32HRM=TOTAL SUBSTANSMÄNGD I VATTNET)

```

```

WRITE(6,60) N
60 FORMAT(///1X,12HTIDSPERIOD ,I3/16(1H*))
   JO=12
   IF(JO.EQ.1) GO TO 70
65 CONTINUE
   JM=1
   JK=1
70 CONTINUE
   CL=C(1)
75 I=2
   K=3
80 I=I-1

C
C   BERÄKNA D/DX(AUC)=D1
C   D1=(A(K)*U(K,N)*C(K)-A(L)*U(L,N)*CL)/(2.0*DX)
C   BERÄKNA AE(DC/DX) =BA
C   BA=(A(I)*E(I)+A(L)*E(L))*(C(I)-CL)/(2.0*DX)
C   BERÄKNA AE(DC/DX) + =BC
C   BC=(A(K)*E(K)+A(I)*E(I))*(C(K)-C(I))/(2.0*DX)
C   BERÄKNA D/DX(AE(DC/DX))=D2
C   D2=(BC-BA)/DX
C   BERÄKNA R
C   R=QS(I,N)/DX*CS(I,N)-AK*A(I)*C(I)
C   BERÄKNA C2=C(I,J)
C   C2=C(I)+(D2+R-D1)*DT/A(I)

C
   IF(C2.LT.0.0) C2=0.0
   CL=C(I)
   C(I)=C2
   IF(I.EQ.2) GO TO 105
   I=I+1
   K=I+1
C   SPECIALFALL FÖR SISTA SEKTIONEN
100 IF(I.EQ.NDS) GO TO 120
   GO TO 80
C   SPECIALFALL FÖR I=1
105 T=VM*C2+EM*C(I)-GM*C2+CM
   V=DM-GM
   C1=T/V
   IF(C1.LT.0.0) C1=0.0
   C(I)=C1
   I=3
   K=4
   GO TO 80
120 CONTINUE
C   GÅ HIT NÄR ALLA SEKTIONER ÄR RÄKNADE FÖR DETTA J
   C(I)=0.0
   JA=JA+1
   IF(JA*DT.LT.ID*86400) GO TO 130
   JA=0
   JO=JO+IB
   IF(JO-63)125,125,121
121 WRITE(6,122)
122 FORMAT(1H1)
   JO=IB+3
125 CONTINUE
   WRITE(6,126) JM, (C(I), I=1,10), JK, J, (C(I), I=11,NDS)
126 FORMAT(//1X,6HDAG ,I3,5X,3HI =6X,1H1,9X,1H2,9X,1H3,9X,1H4,9X,
81H5,9X,1H6,9X,1H7,9X,1H8,9X,1H9,8X,2H10/1X,9(1H*),5X,F10.2,
89F10.2/2X,2HJK,5X,1HJ/1X,I3,2X,I4,(5X,F10.2,9F10.2)/)

```

```
RM=0.
DO 127 I=1,MS
V1=DX*(A(I)+SQRT(A(I)*A(I+1))+A(I+1))/3.
RM1=V1*(C(I)+C(I+1))/2.0
RM=RM+RM1
127 CONTINUE
WRITE(6,128) RM
128 FORMAT(/15X,4HRM =,E10.3)
130 J=J+1
JK=JK+1
C KONTROLLERA OM STATIONÄRT FÖRHÅLLANDE?
DO 135 I=2,MS
G=ABS(CSS(I)-C(I))
IF(G.EE.0) GO TO 140
135 CONTINUE
C GÅ HIT OM STATIONÄRT FÖRHÅLLANDE
136 CONTINUE
N=N+1
GM=SM*(U(1,N)+U(2,N))
CM=QS(1,N)*CS(1,N)*DX/2.0
IF(N.GT.NOP) GO TO 300
JO=4
WRITE(6,60) N
GO TO 65
140 CONTINUE
C ÄR VI I EN NY PERIOD ELLER ÄR BERÄKNINGEN KLAR?
IF(J.GT.JTOT) GO TO 300
IF(JK.GT.JD) GO TO 150
DO 145 I=2,MS
145 CSS(I)=C(I)
GO TO 70
150 JK=1
JM=JM+1
IF(JM.GT.NDP(N)) GO TO 136
GO TO 70
300 STOP
END
```

PROGRAMBESKRIVNING

II. Beräkning av diffusionskoefficienter

Allmänt

Programmet beräknar diffusionskoefficienter för upptill 50 sektioner och vid 10 olika tidpunkter. Tidssteget kan här väljas oberoende av längdsteget.

Beteckningar som ingår har samma betydelse som i programmet för diffusionsadvektionsekvationen.

Utdata

Utmatning av data sker på radskrivare. Utskrift av diffusionskoefficienter sker för varje inre snitt och mellan varje par av successiva tidpunkter. Dessutom beräknar och skriver programmet ut det aritmetiska medelvärdet av diffusionskoefficienterna för varje inre sektion.

Stansning av indata

Kort, Positioner, Parametrar och deras format.

<u>1</u> ,	1 - 10 ;	AK,	E-Format
	11 - 20 ;	DT,	F- "
	21 - 30 ;	DX,	F- "
	31 - 35 ;	NOS,	I - "
	36 - 40 ;	NOP,	I - "

<u>2-</u> ,	1 - 10 ;	A(1),	F- "
	11 - 20 ;	A(2),	F - "
	o s v		

<u> </u>	1 - 10 ;	U(1, 1),	F- "
	11 - 20 ;	U(2, 1),	F- "
	- ;	- ,	-
	- ;	- ,	-
	- ;	U(1, 2),	F- "
	- ;	U(2, 2),	F- "

o s v

Kort, Positioner, Parametrar och deras format.

_____	1 - 10 ;	QS(1, 1),	F-Format
	11 - 20 ;	CS(1, 1),	F- "
	21 - 30 ;	QS(2, 1),	F- "
	31 - 40 ;	CS(2, 1),	F- "
	- ;	- ,	-
	- ;	- ,	-
	O S V		

_____	1 - 10 ;	C(1, 1),	F-Format
	11 - 20 ;	C(2, 1),	F- "
	21 - 30 ;	C(3, 1),	F- "
	- ;	- ,	-
	- ;	- ,	-
	- ;	- ,	-
	- ;	C(1, 2),	F- "
	- ;	C(2, 2),	F- "
	- ;	C(3, 2),	F- "
	- ;	- ,	-
	O S V,		

```

C      PROGRAM FÖR BERÄKNING AV DIFFUSIONSKOEFFICIENTER
C
C      EKVATION:  $SUMMA(A * DX * (DC / DT)) = A * E * (DC / DX) - A * U * C + SUMMA(R * DX)$ 
C
C      A(I) = TVÄRSNITTS AREA
C      AK = AVKLINGNINGSKONSTANT
C      C(I, J) = KONCENTRATIONEN
C      DX = STEGLÄNGD I X-LED
C      DT = STEGLÄNGD I TID
C      E(I, J) = DIFFUSIONSKOEFFICIENTER
C      NOS = ANTAL SEKTIONER
C      NOP = ANTAL MÄTNINGAR I TIDEN
C      QS(I, J) = KÄLLFLÖDE
C      CS(I, J) = KÄLLKONCENTRATION
C      U(I) = STRÖMHASTIGHET
C      R = KÄLLA
C
C      DIMENSION A(50), C(50, 10), CS(50, 10), E(50, 10), EM(50),
&QS(50, 10), U(50, 10)
C      DATA A/50*0., C/500*0., CS/500*0., E/500*0., EM(50*0./,
&QS/500*0./, U/500*0./
C      READ(5, 10) AK, DT, DX, NOS, NOP
C      READ(5, 11) (A(I), I=1, NOS)
C      READ(5, 12) ((U(I, J), I=1, NOS), J=1, NOP)
C      READ(5, 12) ((QS(I, J), CS(I, J), I=1, NOS), J=1, NOP)
C      READ(5, 12) ((C(I, J), I=1, NOS), J=1, NOP)
10  FORMAT(E10.3, 2F10.0, 2I5)
11  FORMAT(8F10.0)
12  FORMAT(8F10.3)
C      WRITE(6, 15) AK, DT, DX, NOS, NOP
15  FORMAT(1H1, 6HINCATA/1H0, 4HAK =, E10.3, 4X, 4HDT =, F7.0, 6X,
&4HDX =, F7.0, 6X, 5HNOS =, I5, 6X, 5HNOP =, I5/)
C      K=12
C      J=1
C      WRITE(6, 16) J
16  FORMAT(/2X, 3HJ =, I2/1X, 2H I, 6X, 6HC(I, J), 5X, 7HQ(S(I, J), 5X,
&7HCS(I, J), 6X, 6HU(I, J), 8X, 4HA(I/))
C      DO 18 I=1, NOS
C      WRITE(6, 17) I, C(I, J), QS(I, J), CS(I, J), U(I, J), A(I)
17  FORMAT(1X, I2, 3(2X, F10.3), F10.4, 2X, F10.0)
C      K=K+1
18  CONTINUE
C      DO 24 J=2, NOP
C      K=K+4
C      WRITE(6, 20) J
20  FORMAT(/2X, 3HJ =, I2/1X, 2H I, 6X, 6HC(I, J), 5X, 7HQ(S(I, J), 5X,
&7HCS(I, J), 6X, 6HU(I, J) /)
C      DO 24 I=1, NOS
C      K=K+1
C      WRITE(6, 21) I, C(I, J), QS(I, J), CS(I, J), U(I, J)
21  FORMAT(1X, I2, 3(2X, F10.3), F10.4)
C      IF(K-63)24, 24, 22
22  WRITE(6, 23)
23  FORMAT(1H1)
C      WRITE(6, 20) J
C      K=7
24  CONTINUE
C      M=NOS-1
C      N=NOP-1
C      Z=DX/(2*DT)

```

```

X=1/(4*DX)
ST=0.0
DO 35 J=1,N
ST=A(I)*(C(I,J+1)-C(I,J))*Z
R=QS(I,J)*CS(I,J)-AK*A(I)*C(I,J)*DX/2
DO 30 I=2,M
ST=ST+A(I)*(C(I+1,J+1)+C(I-1,J+1)-C(I+1,J)-C(I-1,J))*Z
CX=A(I)*(C(I+1,J+1)+C(I+1,J)-C(I-1,J+1)-C(I-1,J))*X
AC=A(I)*U(I,J)*C(I,J)
R=R+QS(I,J)*CS(I,J)-AK*A(I)*C(I,J)*DX
E1=(ST+AC-R)/CX
E(I,J)=E1
IF(E1.LT.0.)GO TO 35
30 CONTINUE
35 CCNTINUE
I=1
55 CGNTINUE
ES=0.
I=I+1
DO 65 J=1,N
E2=E(I,J)
IF(E2.LT.0.0) E2=0.0
ES=ES+E2
65 CONTINUE
EM(I)=ES/N
IF(I.LT.M) GO TO 55
GO TO 80
75 CONTINUE
WRITE(6,76)
76 FORMAT(1H1,2H X,12X,6HE(X,0),4X,6HE(X,1),4X,6HE(X,2),
&4X,6HE(X,3),4X,6HE(X,4),4X,6HE(X,5),4X,6HE(X,6),4X,
&6HE(X,7),4X,6HE(X,8),4X,6HE(X,9))
GO TO 92
80 CONTINUE
K=NOS-2
WRITE(6,85)
85 FORMAT(1H1,64(1H*)/1X,1H*,62X,1H*/1X,1H*,4X,
&54HDIFFUSIONSKOEFFICIENTER I SEKTION X VID TIDEN 0,1,2,.,.,
&4X,1H*/1X,1H*,62X,1H*/1X,64(1H*))
WRITE(6,90)
90 FORMAT(1H-,2H X,12X,6HE(X,0),4X,6HE(X,1),4X,6HE(X,2),
&4X,6HE(X,3),4X,6HE(X,4),4X,6HE(X,5),4X,6HE(X,6),4X,
&6HE(X,7),4X,6HE(X,8),4X,6HE(X,9))
DO 92 I=1,K
WRITE(6,91)I,(E(I+1,J),J=1,N)
91 FORMAT(/1X,I2,8X,10F10.2)
IF(I.GT.25) GO TO 75
92 CONTINUE
WRITE(6,93)
93 FORMAT(1H1,58(1H*)/1X,1H*,56X,1H*/1X,1H*,4X,
&48HMEDELVÄRDET AV DIFFUSIONSKOEFFICIENTER I SNITT X,4X,
&1H*/1X,1H*,56X,1H*/1X,58(1H*)//1X,2H X,22X,4HE(X))
DO 95 I=1,K
WRITE(6,94)I,EM(I+1)
94 FORMAT(/1X,I2,16X,F10.2)
95 CONTINUE
STOP
END

```