

PREDGOVOR

Intencija ovog kolegija nije detaljna razrada numeričkih shema implementiranih u izvornicima programskih rješenja. Zbog toga se u ovoj skripti učestalo poziva na reference u kojima svi zainteresirani mogu naći iscrpna objašnjenja. Isto tako, veći dio referenci na raspolaganju je u pdf formatu a koje polaznici kolegija mogu dobiti od autora ove skripte.

Osnovna ideja kolegija je da se slušači upute u modelske jednadžbe procesa, upotrebu odgovarajućih početnih i rubnih uvjeta modela te da se skrene pažnja na pojednostavljenja, pretpostavke i prilagodbe korištene u uspostavi modela.

U svakom poglavlju ove skripte na početku se iznosi odgovarajuća teoretska podloga za nastavno uspostavljeni model, pogodan za daljnju numeričku implementaciju.

Na kraju skripte dani su ogledni riješeni zadaci, koji se u sličnoj formi zadaju i polaznicima kolegija za rješavanje u sklopu predviđenih vježbi. U svim zadacima predviđena je usporedba modelskih rezultata s rezultatima dobivenim mjerenjem ili teoretskim modelima.

Suplement ovoj skripti su i priložena 4 primjera s obradom tematskih jedinica iz skripte, no na složenijoj razini razrade. Primjeri trebaju poslužiti za uvid u mogućnosti modernih modelskih rutina.

Poželjno je da polaznici kolegija imaju solidno znanje iz svih prethodno odslušanih hidrotehničkih predmeta te iz matematike 3 u kojoj je provedbenim programom predviđena razrada numeričkih shema za obične i parcijalne diferencijalne jednadžbe (hiperbolne, eliptičke i paraboličke).

Skripta je podijeljena u 4 cjeline: Prva cjelina se odnosi na modeliranje kontinuirane akvatičke sredine (mora, jezera rijeke). Druga cjelina obuhvaća modeliranje strujanja i pronosa u stijeni međuzrnske poroznosti. Treća cjelina rezervirana je za modeliranje procesa u eko sustavu, kao bitne sastavnice u modelima iz prve ili druge cjeline. U četvrtoj cjelini dana je razrada modela valnog generiranja uslijed djelovanja vjetra a u petoj cjelini opisane su osnove modeliranja za sustave pod tlakom.

SADRŽAJ:

A- MODELIRANJE STRUJANJA I PRONOSA U KONTINUIRANOJ AKVATIČKOJ SREDINI

- 1. OSNOVNE JEDNADŽBE STRUJANJA TEKUĆINE I TRANSFERA TOPLINE**
 - 1.1. Zakon očuvanja mase u tri dimenzije
 - 1.2. Jednadžba očuvanja količine gibanja u tri smjera
 - 1.3. Jednadžba očuvanja energije u tri smjera
 - 1.3.1. Jednadžbe stanja
- 2. NAVIER-STOKES JEDNADŽBA ZA NEWTON-OVU TEKUĆINU**
 - 2.1. Konzervativni oblik jednadžbi strujanja tekućine
- 3. DIFERENCIJALNA I INTEGRALNA FORMA OPĆE JEDNADŽBE PRONOSA**
- 4. KLASIFIKACIJA PO FIZIKALNIM KARAKTERISTIKAMA**
- 5. MODELI TURBULENCIJE**
 - 5.1. Reynolds-ovo osrednjavanje Navier-Stokes jednadžbi za nestišljive tekućine
 - 5.2. Proračun turbulentnih tokova
 - 5.3. „RANS mixing length“ model turbulencije
 - 5.4. „RANS k- ϵ “ model turbulencije
- 6. MODEL TRODIMEZIONALNOG STRUJANJA U OTVORENOM VODOTOKU**
- 7. MODEL DVODIMENZIONALNOG STRUJANJA U OTVORENOM VODOTOKU**
- 8. TOPLINSKA IZMJENA S ATMOSFEROM ZA 2D I 3D MODEL**

B- MODELIRANJE STRUJANJA I PRONOSA U STIJENI MEĐUZRNSKE POROZNOSTI

- 1. UVOD**
- 2. OSNOVNI ZAKONI I JEDNADŽBE PROCESA**
 - 2.1. Zakon očuvanja mase
 - 2.2. Komponente pronosa
 - 2.3. Generalizacija Fickovog zakona
 - 2.3.1. Difuzija
 - 2.3.2. Disperzija
 - 2.4. Jednadžba pronosa
 - 2.5. Početni i rubni uvjeti
- 3. REAKTIVNI PROCESI**
 - 3.1. Utjecaj odumiranja i razgradnje
 - 3.2. Izmjena tvari između krute i tekuće faze
 - 3.3. Retardacija
- 4. MODEL STRUJANJA I PRONOSA U STIJENAMA MEĐUZRNSKE POROZNOSTI**

C- MODELIRANJE PROCESA U EKO SUSTAVU

1. UVOD

2. POPULACIJSKI MODEL

3. MICHAELIS-MENTEN KINETIKA

4. MODEL EKOSUSTAVA

- 4.1. Ekosustav sa dva člana (predator – plijen)
- 4.2. Ekosustav sa tri člana (NPZ)
- 4.3. Ekosustav sa četiri člana (NPZD)
- 4.4. Poveznica s hidrodinamičkim modelom konvektivne disperzije

D- MODELIRANJE VALNOG GENERIRANJA

1. UVOD

2. FORMULACIJA PROBLEMA VALNOG GENERIRANJA

- 2.1. Mehanizam generiranja valova vjetrom
 - 2.1.1. *Teorije prijenosa energije vjetra na valove - Milesova teorija*
 - 2.1.2. *Modelska implementacija*
- 2.2. Nelinearno međudjelovanje valova
- 2.3. Spektralna disipacija u dubokovodnom području
 - 2.3.1. *Disipacija uslijed loma valova*
- 2.4. Nelinearno međudjelovanje u plitkovodnom području
 - 2.4.1. *Disipacija na dnu*

3. MODEL VALNOG GENERIRANJA

E- MODELIRANJE SUSTAVA POD TLAKOM

1. UVOD

Vježba 1 – 3D model strujanja u otvorenom vodotoku

Vježba 2 – 2D model strujanja u otvorenom vodotoku

Vježba 3 – 2 model strujanja u stijeni pukotinske poroznosti

Vježba 4 – model eko sustava s dvije varijable

Vježba 5 – model valnog generiranja

Vježba 6 – model sustava pod tlakom

Primjer 1 – 3D model strujanja i eko sustava u otvorenom vodotoku

Primjer 2 – 2D model strujanja u otvorenom vodotoku

Primjer 3 – 3D model strujanja u stijeni pukotinske poroznosti

Primjer 4 – model valnog generiranja

Numerički (matematički) modeli

Riječ model ima puno definicija koje opisuju njeno značenje i toliko je često u upotrebi da je ponekad teško razaznati njeno značenje. Model je možda najjednostavnije definirati kao približan prikaz stvarnog sustava ili procesa. Konceptualni model je hipotetski prikaz načina na koji neki sustav ili proces djeluju. Ta hipoteza kvantitativno se može prikazati kao matematički model. Matematički modeli na apstraktan način prikazuju procese kroz jednačbe, a fizička svojstva kroz konstante ili koeficijente. Karakterizacija stanja ili njihov potencijal u sustavu se predstavljaju kao varijable.

Većina matematičkih modela, koji su danas u upotrebi, su determinističkog karaktera. Deterministički modeli se temelje na zakonu očuvanja mase, količine gibanja i energije te prikazuju uzročno-posljedične veze. Temeljna pretpostavka je da postoji visoki stupanj razumijevanja o procesima koji djeluju u sustavu te je moguće unaprijed odrediti reakcije sustava na bilo koji skup djelovanja.

Deterministički modeli uglavnom trebaju rješavanje parcijalnih diferencijalnih jednačbi. Točna rješenja dobivaju se analitičkim rješavanjem no analitički modeli zahtijevaju visok stupanj idealizacije parametara i rubnih uvjeta. Heterogenost (prostorna raznolikost) svojstva realne sredine vodotoka ili vodonosnika predstavlja važnu značajku i osnovna je karakteristika svih realnih kontinuiranih akvatičkih ili geoloških sustava. Stoga je uobičajeno koristiti modele sa prostorno i/ ili vremenski varijabilnim parametrima koji omogućavaju vjerniji prikaz realne sredine. Numeričke metode rješavanja jednačbi procesa daju približna rješenja kroz prostornu i vremensku diskretizaciju. U okvirima promatrane modelske domene promjenjiva svojstva te granice i djelovanja vezana za promatrani sustav dane su kao pretpostavljene vrijednosti.

Broj i oblik jednačbi koje se rješavaju određuje se temeljem poznavanja dominantnih procesa. Koeficijenti u jednačbama su pokazatelji svojstva, rubnih uvjeta i djelovanja na promatrani sustav. Zavisne varijable u jednačbama su pokazatelji stanja sustava i matematički su određene rješenjem jednačbi. Kada se numerički algoritam prikazan u računalnom kodu upotrijebi za rješavanje jedne ili više parcijalnih diferencijalnih jednačbi, rezultirajući računalni kod može se smatrati generičkim modelom. Kada se dimenzije diskretizacije mreže, rubni uvjeti i koeficijenti filtracije odnose na određeno geografsko područje, tada se dobiva karakteristični model područja. Sposobnost generičkih modela za točno rješavanje jednačbi procesa se u pravilu verificira kroz primjenu na pojednostavljenim problemima. Ta sposobnost ne uvjetuje jednaku točnost kada se isti model primjeni na problem sa složenijom problematikom.

Korisnik mora biti svjestan zanemarenih detalja i usvojenih pretpostavki kako se ne bi pojavile značajnije nezamijećene greške.

U determinističkim modelima prisutna je kontrola nad svim parametrima i varijablama a ponašanje tih modela je unaprijed predvidivo. Varijable se odnose na koordinate prostora x , y , z i parametre vremena t . U većini modela, naročito u relativno jednostavnim primjerima, dovoljno je formulirati problem uzevši u obzir samo podskup te četiri varijable.

U ovisnosti o broju prostornih dimenzija, govori se o *0D*, *1D*, *2D* ili *3D* modelima. 0D modeli ovisni su o jednoj varijabli i to o vremenu t . 0D modeli podrazumijevaju homogenost sustava, tj. da je trenutno stanje po cijelome kontrolnom volumenu nepromjenljivo. Npr. trenutna koncentracija je u svakoj točki promatranog volumena jednaka. Kako je vrijeme t jedina nezavisna varijabla i u stacionarnom kontrolnom volumenu, analitičkom formulacijom dolazi se do *običnih diferencijalnih jednadžbi*, u kojima nepoznate funkcije ovise samo o jednoj nezavisnoj varijabli. Ako je nepoznata funkcija, funkcija više varijabli, takvu jednadžbu nazivamo *parcijalnom diferencijalnom jednadžbom*.

Modeli koji nisu ovisni o vremenu nazivaju se *stacionarni modeli*, a modeli ovisni o vremenu *nestacionarni modeli*. Do stacionarnog stanja dolazi se u idealiziranim modelima, a neophodan uvjet za stacionarno stanje je taj da su vanjski procesi ili parametri nepromjenjivi u vremenu.

1D modelima promatraju se npr. promjene u vertikalnom ili horizontalnom smjeru sustava, primjerice vertikalni ili horizontalni pronos zagađivala ili evaporacije prema površini. Također se procesi u rijekama (maksimalne razine vodostaja ili kretanje zagađivala nizvodno) mogu promatrati 1D modelima. Voda od površinskog vodotoka koja infiltrira u vodonosnik može se opisati 1D modelom, uz uvjete da su osnovni tok i dimenzije promatranog prostora konstantne. 1D modeli za stacionarno stanje opisuju se jednostavnim diferencijalnim jednadžbama. Modeli nestacionarnog stanja, uključujući barem jedan smjer u prostoru, opisuju se parcijalnim diferencijalnim jednadžbama.

2D modeli uključuju dvije prostorne varijable. Primjerice, *horizontalni dvodimenzionalni* modeli za opisivanje procesa pronosa u kojima je horizontalna dimenzija toka dominantno veća od dubine toka u otvorenim vodotocima ili debljine vodonosnog sloja.

3D modeli koriste se za praćenje promjena po cijelome promatranom volumenu, za sve tri prostorne varijable. 3D modeli su dosta kompleksni modeli i pogodni su za modeliranje pronosa u okolini izvora zagađivanja koji se pretpostavlja da je uglavnom točkasti. Kod izrade takvih modela pronosa u višedimenzionalnim stacionarnim ili nestacionarnim problemima, koriste se numerički algoritmi koji najčešće koriste metode konačnih razlika, konačnih volumena ili konačnih elemenata.

Uspostava modela provodi se kroz nekoliko koraka. Proces izrade od prirodnog sistema do odgovarajućeg modela sadrži različite korake, gdje svaki korak ovisi o dobro obavljenom

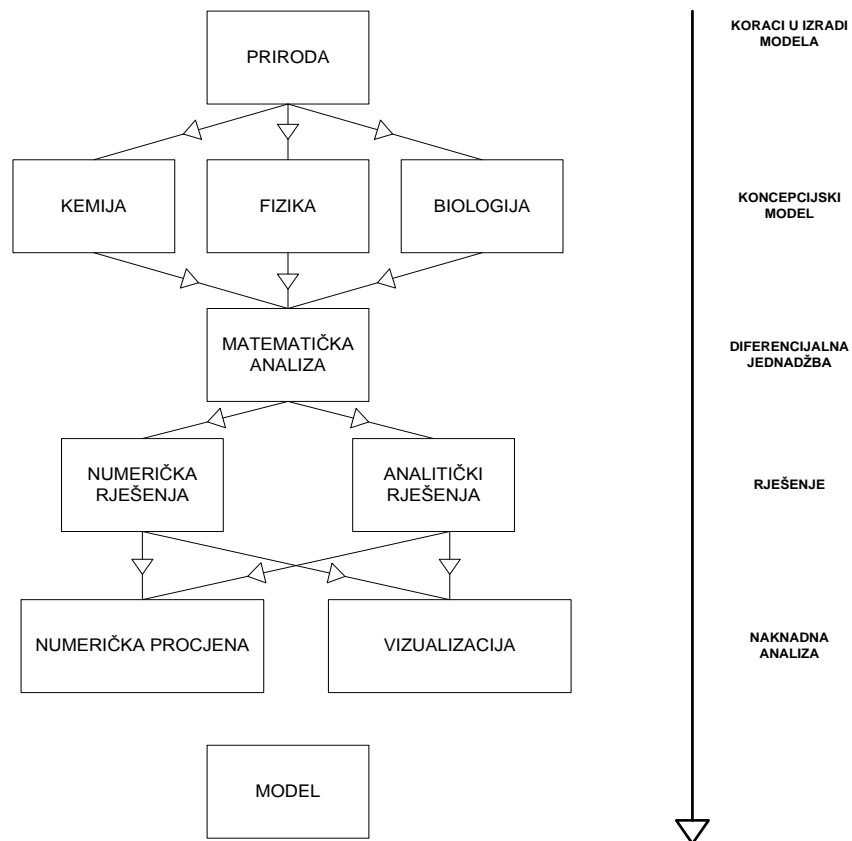
prethodnom koraku. Glavni cilj je da se izradi konceptualni model koji se može opisati matematičkom analizom i kojim se rješavaju diferencijalne jednačbe. Na slici 1 prikazani su koraci modeliranja. Prvi korak je formuliranje koncepta. Koncept se izrađuje iz poznatih ili raspoloživih znanstvenih podataka i ekspertiza, kao i iz podataka koji se dobiju promatranjem predmetnog sustava. Koncept sadrži sve procese koji su neophodni za procjenu dinamike sustava. Izrada konceptijskog modela ne sadrži numeričke podatke. Primjerice, kod modeliranja procesa u ekologiji, moraju se uključiti znanstvene discipline kao što su: kemija, fizika, biologija, geologija, ekologija, hidrologija i hidraulika.

Slijedeći korak je formulacija konceptualnog modela sa matematičkim izrazima. Funkcije varijabli i parametara vremena i prostora povezane su matematičkim izrazima. Kombinacijom i transformacijom tih izraza, te korištenjem teoretskih i empirijskih zakona i principa, dolazi se do diferencijalnih jednačbi. U jednostavnim primjerima dolazi se do jedne jednačbe, a općenito se dolazi do cijelog sustava jednačbi.

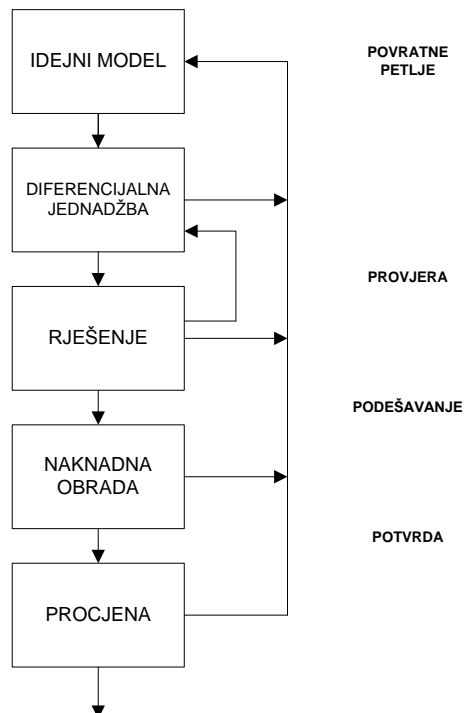
Slijedeći korak u modeliranju je rješavanje sustava jednačbi sa kojim se opisuje analizirani proces temeljem analitičkih izraza ili numeričke modelske implementacije.

Povratne petlje u uspostavi modela potrebne su da bi se poboljšali raniji koraci, da bi se ispravile greške i da bi se model prilagodio u pogledu izmjerenih podataka. Na slici 2 prikazane su povratne petlje u procesu uspostave modela koje se dijele na provjeru, podešavanje i potvrdu. Izraz *provjera* koristi se prilikom testiranja i razvoja proračunskog koda za modeliranje. Kako bi se provjerio pravilan rad proračunskog koda, testiraju se poznati slučajevi kako bi se vidjelo da model daje točan rezultat. Testiranja se mogu bazirati na jednostavnim naknadnim provjerama, na analitičkim rješenjima i usporedbom s rezultatima drugih modela.

Usporedba rezultata test primjera, naziva se *benchmarking* ili sustavno vrednovanje/ocjenjivanje. U koracima testiranja provjerava se da li proračunato rješenje donosi rezultat diferencijalnih jednačbi. Izraz kalibracija ili baždarenje modela koristi se za proceduru podešavanja parametra modela za specifičnu aplikaciju proračunskog koda. U slučaju da se rezultat provjere ili usporedbe pokaže kao nezadovoljavajući, podešavaju se parametri, rade se izmjene matematičkih jednačbi ili se podešava konceptualni model. Ako se rezultatom provjere dokaže da je model točan, tada se može reći da se model ponaša kao reprezentativni prirodni ili realni sustav. Mora se utvrditi koji se dijelovi realnog sustava prezentiraju numeričkim modelom. Kako model nije identičan reprezentativnom stvarnom sustavu, uvijek su prisutni i stvarni aspekti za koje model nije dostatan. Matematička formulacija mora biti bazirana na dobro koncipiranom modelu i mora biti potpuna.



Slika 1 Koraci izrade modela



Slika 2 Provjera, podešavanje i potvrda prikazane kao povratne petlje različitih razina izrade modela

A

MODELIRANJE STRUJANJA I PRONOSA U
KONTINUIRANOJ AKVATIČKOJ SREDINI

1. Osnovne jednadžbe strujanja tekućine i transfera topline

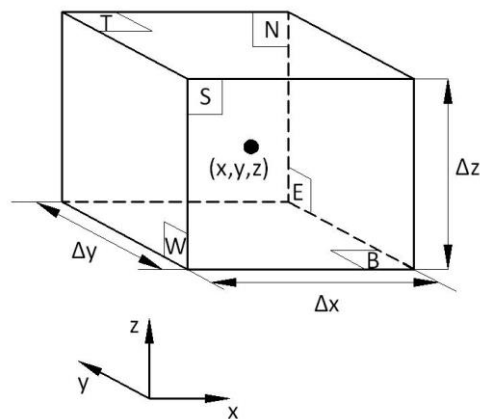
Osnovne jednadžbe strujanja tekućina predstavljene su matematičkim izrazima zakona očuvanja polja:

- Zakon očuvanja mase;
- Zakon očuvanja količine gibanja (drugi Newton-ov aksiom);
- Zakon očuvanja energije (prvi zakon termodinamike).

Usvojene pretpostavke:

- Tekućina se promatra kao kontinuum;
- U analizi tekućina na makroskopskoj skali ($1 \mu\text{m}$ i veće) molekularna struktura i molekularna gibanja se zanemaruju;
- Opisuje se ponašanje tekućine u smislu makroskopskih svojstava, poput brzine, tlaka, gustoće i temperature, te njihovih vremenskih i prostornih derivacija.

Promatramo djelić tekućine sa stranicama Δx , Δy i Δz :



Slika 1

Za stranice se primjenjuje se nomenklatura N , S , E , W , T i B , sa značenjem Sjever (North), Jug (South), Istok (East), Zapad (West), Vrh (Top) i Dno (Bottom). Težište elementa je locirano koordinatom (x, y, z) .

Proračun promjena mase, količine gibanja i energije elementa tekućine nastale strujanjem kroz njegove granice, te ukoliko postoje izvori, kroz djelovanje ponora i izvora unutar elementa, vodi do jednadžbi strujanja tekućine.

Sva svojstva tekućine su funkcija prostora i vremena pa bi striktnim poštivanjem matematičkoj formalizma bilo potrebno pisati $\rho(x, y, z, t)$, $p(x, y, z, t)$, $T(x, y, z, t)$ i $\mathbf{u}(x, y, z, t)$ za gustoću, tlak, temperaturu i vektor brzina.

Promatrani element je dovoljno mali da se svojstva tekućine na površinama ("licima"-eng: faces) mogu zadovoljavajuće precizno izraziti s razvojem prva dva člana Taylor-ovog reda. Primjerice, tlak na W i E licima, koja su na udaljenostima $1/2 \delta x$ od težišta elementa, može se izraziti:

$$p - \frac{\partial p}{\partial x} \frac{1}{2} \Delta x \quad i \quad p + \frac{\partial p}{\partial x} \frac{1}{2} \Delta x$$

1.1. Zakon očuvanja mase u tri dimenzije

Rata prirasta mase u elementu tekućine	=	sumarni protok mase (dotok) u element tekućine
----------------------------------------	---	------------------------------------------------

Rata prirasta mase unutar elementa tekućine je:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \Delta x \Delta y \Delta z) = \frac{\partial \rho}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z \quad (1.1)$$

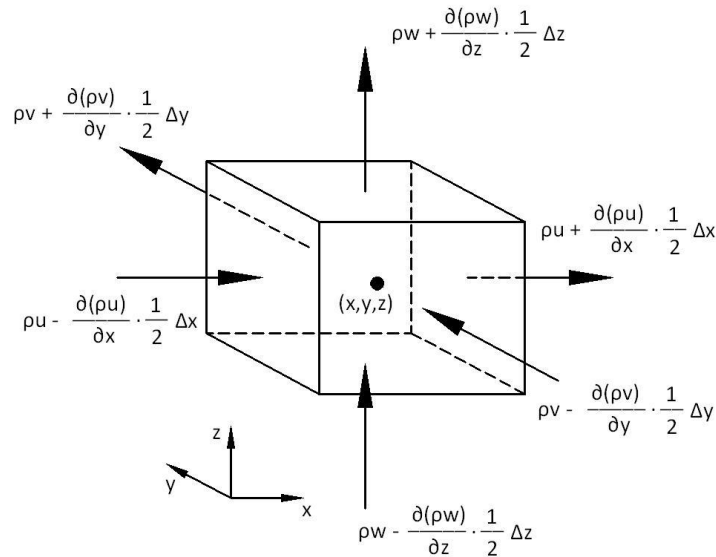
Protok mase kroz lice elementa je dan kao umnožak gustoće, površine i komponente brzine okomite na površinu lica. Sumarni protok mase (dotok) u element kroz njegove granice (lica) dan je izrazom :

$$\begin{aligned} & \left(\rho u - \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \frac{1}{2} \Delta x \right) \Delta y \Delta z - \left(\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \frac{1}{2} \Delta x \right) \Delta y \Delta z + \left(\rho v - \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \frac{1}{2} \Delta y \right) \Delta x \Delta z \\ & - \left(\rho v + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \frac{1}{2} \Delta y \right) \Delta x \Delta z + \left(\rho w - \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \frac{1}{2} \Delta z \right) \Delta x \Delta y - \left(\rho w + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \frac{1}{2} \Delta z \right) \Delta x \Delta y \end{aligned}$$

Strujanje usmjereno u element uzrokuje povećanje mase u elementu i ima pozitivan predznak dok izlazno strujanje iz elementa poprima negativan predznak.

Rata promjene mase unutar elementa svedena je na sumarni protok mase kroz lica elementa (oplošje elementa).

Svi članovi rezultatne bilancne jednadžbe mase se postavljaju na lijevu stranu znaka jednakosti te se izraz dijeli sa volumenom elementa $\Delta x \Delta y \Delta z$. Time se dobiva trodimenzionalni nestacionarni oblik zakona očuvanja mase ili jednadžba kontinuiteta za točku stišljive tekućine:



Slika 2

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad \text{ili} \quad \frac{\partial p}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1.2)$$

U slučaju nestišljive tekućine ρ je konstantna pa prethodni izraz prelazi u:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad \text{ili} \quad \text{div} \mathbf{u} = 0 \quad (1.3)$$

1.2. Jednadžba očuvanja količine gibanja u tri smjera

Rata prirasta količine gibanja
elementa tekućine = Suma vanjskih sila
na element tekućine

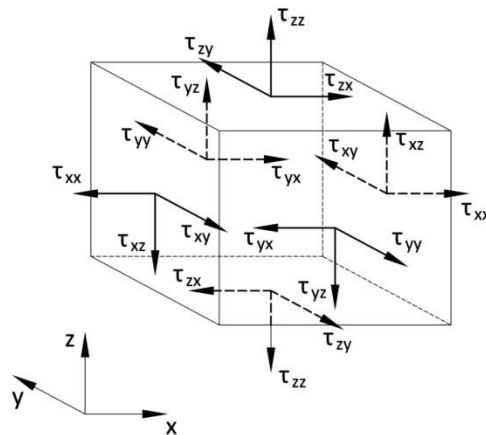
Rata prirasta količine gibanja u x , y i z smjeru po jedinici volumena djelića tekućine predstavlja se članovima:

$$\rho \frac{Du}{Dt} \quad \rho \frac{Dv}{Dt} \quad \rho \frac{Dw}{Dt}$$

Prisutne su dvije vrste sila na djelić tekućine: površinske (sila tlaka, sila viskoznosti), masene (centrifugalna sila, Coriolis-ova sila).

Učestala je praksa da se površinske sile separiraju sa zasebnim članovima dok se učešće masenih sila tretira kroz članove izvora/ponora.

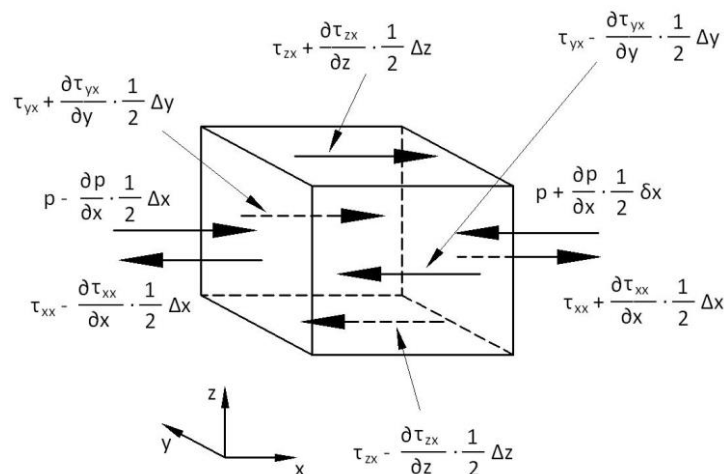
Stanje naprezanja elementa tekućine definira se članovima tlaka i devet komponenti viskoznog naprezanja. Tlak predstavlja normalno naprezanje, i notiran je sa p . Za viskozna naprezanja koristi se oznaka τ .



Slika 3

Uobičajena indeksna notacija τ_{ij} koristi se za indicaciju smjera djelovanja viskoznih naprezanja. Indeksi i te j u oznaci τ_{ij} ukazuju da komponenta naprezanja djeluje u j smjeru na površinu okomitu na i smjer.

Prvo analiziramo x -komponentu sile tlaka p i naprezanja τ_{xx} , τ_{yx} , τ_{zx} . Sile usmjerene u smjeru pozitivne orijentacije x osi poprimaju pozitivan predznak odnosno negativan predznak ukoliko su suprotnog smjera. Na lica E i W imamo:



Slika 4

$$\left[\left(p - \frac{\partial p}{\partial x} \frac{1}{2} \Delta x \right) - \left(\tau_{xx} - \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \frac{1}{2} \Delta x \right) \right] \Delta y \Delta z + \left[- \left(p + \frac{\partial p}{\partial x} \frac{1}{2} \Delta x \right) + \left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \frac{1}{2} \Delta x \right) \right] \Delta y \Delta z = \left(- \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \right) \Delta x \Delta y \Delta z \quad (1.4)$$

Ukupna sila na parove lica N , S i T , B su:

$$-\left(\tau_{yx} - \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \frac{1}{2} \Delta y\right) \Delta x \Delta z + \left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \frac{1}{2} \Delta y\right) \Delta x \Delta z = \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \Delta x \Delta y \Delta z \quad (1.5)$$

$$-\left(\tau_{zx} - \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \frac{1}{2} \Delta z\right) \Delta x \Delta y + \left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \frac{1}{2} \Delta z\right) \Delta x \Delta y = \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \Delta x \Delta y \Delta z \quad (1.6)$$

Ukupna sila po jedinici volumena uzrokovana navedenim površinskim naprezanjima jednaka je njihovoj sumi dijeljenoj sa volumenom $\Delta x \Delta y \Delta z$:

$$\frac{\partial(-p + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z}$$

Bez detaljnijeg razmatranja masenih sila njihov utjecaj uzet je u obzir uvođenjem člana izvora S_{Mx} u odgovarajućoj jednadžbi količine gibanja za x smjer po jedinici volumena i u jediničnom vremenu.

Izraz za x komponentu zakona očuvanja količine gibanja dobiva se izjednačavanjem rate promjene količine gibanja djelića tekućine i ukupne sile u x smjeru od površinskih sila plus rata prirasta količine gibanja od djelovanja izvora (za y i z komponentu dobiva se analogno) :

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial(-p + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + S_{Mx} \quad (1.7a)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial(-p + \tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + S_{My} \quad (1.7b)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial z} + \frac{\partial(-p + \tau_{zz})}{\partial z} + S_{Mz} \quad (1.7c)$$

1.3. Jednadžba očuvanja energije u tri smjera

Primjenom prvog zakona termodinamike:

Rata prirasta energije elementa tekućine	=	ukupna rata topline predane elementu tekućine	+	ukupna rata rada izvršenog na elementu tekućine
---------------------------------------------	---	-----------------------------------------------------	---	-------------------------------------------------------

Izraz za ratu prirasta energije čestice tekućine po jediničnom volumenu ima oblik:

$$\rho \frac{DE}{Dt}$$

Rata rada izvršenog na česticu tekućine u promatranom elementu putem djelovanja površinskih sila jednaka je umnošku sile i komponente brzine u smjeru djelovanja sile. Rad sila koje djeluju u x smjeru dan je sa:

$$\begin{aligned} & \left[\left(pu - \frac{\partial(pu)}{\partial x} \frac{1}{2} \Delta x \right) - \left(\tau_{xx}u - \frac{\partial(\tau_{xx}u)}{\partial x} \frac{1}{2} \Delta x \right) - \left(pu + \frac{\partial(pu)}{\partial x} \frac{1}{2} \Delta x \right) + \left(\tau_{xx}u + \frac{\partial(\tau_{xx}u)}{\partial x} \frac{1}{2} \Delta x \right) \right] \Delta y \Delta z \\ & + \left[- \left(\tau_{yx}u - \frac{\partial(\tau_{yx}u)}{\partial y} \frac{1}{2} \Delta y \right) + \left(\tau_{yx}u + \frac{\partial(\tau_{yx}u)}{\partial y} \frac{1}{2} \Delta y \right) \right] \Delta x \Delta z \\ & + \left[- \left(\tau_{zx}u - \frac{\partial(\tau_{zx}u)}{\partial z} \frac{1}{2} \Delta z \right) + \left(\tau_{zx}u + \frac{\partial(\tau_{zx}u)}{\partial z} \frac{1}{2} \Delta z \right) \right] \Delta x \Delta y \end{aligned}$$

Ukupna rata rada površinskih sila koje djeluju u x smjeru dan je izrazom:

$$\left[\frac{\partial(u(-p + \tau_{xx}))}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \right] \Delta x \Delta y \Delta z$$

Komponente površinskog naprezanja u y i z smjeru također imaju učešće pri radu izvršenom na česticu tekućine. Dodatna rata rada koja je izvršena na česticu tekućine kroz izvršeni rad tih površinskih sila je:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v(-p + \tau_{yy}))}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} \right] \Delta x \Delta y \Delta z \\ & \left[\frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w(-p + \tau_{zz}))}{\partial z} \right] \Delta x \Delta y \Delta z \end{aligned}$$

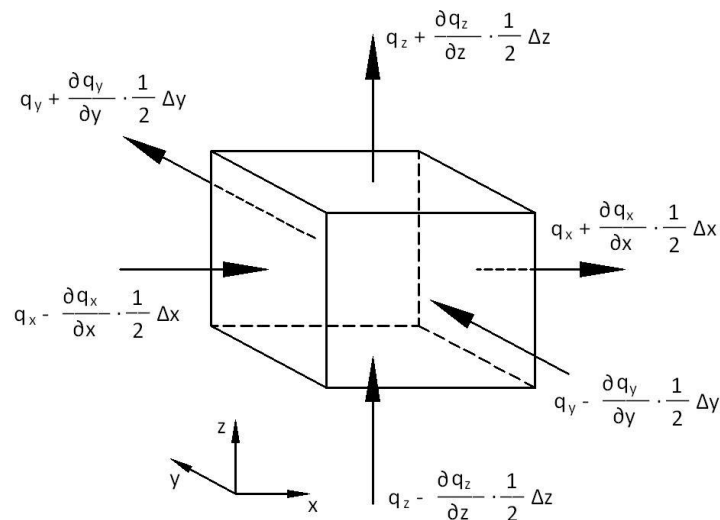
Ukupna rata rada izvršenog na česticu tekućine jediničnog volumena od strane svih površinskih sila je dobivena sumacijom te dijeljenjem sa volumenom $\Delta x \Delta y \Delta z$. Članovi koji sadrže tlak mogu se združiti i zapisati u kompaktnijoj vektorskoj formi:

$$-\frac{\partial(up)}{\partial x} - \frac{\partial(vp)}{\partial y} - \frac{\partial(wp)}{\partial z} = -\text{div}(p\mathbf{u}) \quad (1.8)$$

Time je dobiven sljedeći izraz za ukupnu ratu rada izvršenog na čestici tekućine putem površinskih naprezanja:

$$\begin{aligned} & [-\text{div}(\mathbf{p}\mathbf{u})] + \left(\frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \right) \\ & + \left(\frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

Vektor toplinskog toka \mathbf{q} ima tri komponente: q_x , q_y i q_z .



Slika 5

Ukupna rata toplinske izmjene na česticu tekućine putem toplinskog toka u x smjeru je dan kroz razliku rate unešene topline (kroz lice W) i rate iznešene topline (kroz lice E):

$$\left[\left(q_x - \frac{\partial q_x}{\partial x} \frac{1}{2} \Delta x \right) - \left(q_x + \frac{\partial q_x}{\partial x} \frac{1}{2} \Delta x \right) \right] \Delta y \Delta z = -\frac{\partial q_x}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z \quad (1.9)$$

$$-\frac{\partial q_y}{\partial y} \Delta x \Delta y \Delta z \text{ (u y smjeru)} \quad -\frac{\partial q_z}{\partial z} \Delta x \Delta y \Delta z \text{ (u z smjeru)}$$

Ukupna rata topline koja je dodana jediničnom volumenu čestice tekućine putem toplinskog toka kroz njegove granice (lica) je suma podijeljena sa $\Delta x \Delta y \Delta z$:

$$-\frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y} - \frac{\partial q_z}{\partial z} = -\text{div} \mathbf{q} \quad (1.10)$$

Fourier-ov zakon vođenja topline povezuje toplinski tok i lokalni gradijent temperature na način:

$$q_x = -k \frac{\partial T}{\partial x} ; \quad q_y = -k \frac{\partial T}{\partial y} ; \quad q_z = -k \frac{\partial T}{\partial z} \quad (1.11a,b,c)$$

Ili u vektorskoj formi:

$$\mathbf{q} = -k \text{grad} T \quad (1.12)$$

Konačna forma izraza za ratu prirasta topline za česticu tekućine putem vođenja topline kroz rubove (lica) elementa glasi:

$$-\text{div} \mathbf{q} = \text{div}(k \text{grad} T) \quad (1.13)$$

Potrebno je definirati pojam specifične energije tekućine E . Uobičajena je praksa da se zbrajaju unutarnja (termalna) energija i , kinetička energija $\frac{1}{2} (u^2 + v^2 + w^2)$ i gravitaciona potencijalna energija. Takva definicija promatra element tekućine sa svojstvom sadržavanja gravitacione potencijalne energije.

Gravitacionu potencijalnu energiju može se promatrati kao masenu silu sa doprinosom radu na element tekućine pri njegovom kretanju kroz gravitaciono polje. U našem pristupu efekti promjene potencijalne energije uzeti su u obzir kao članovi izvora definirajući izvor energije S_E po jediničnom volumenu u jedinici vremena.

Očuvanje energije čestice tekućine uspostavlja se izjednačenjem rate promjene energije čestice tekućine sa sumom ukupne rate rada izvršenog na česticu tekućine, ukupne rate dodane topline tekućini te rati povećanja energije putem izvora.

Odgovarajuća energetska jednažba je:

$$\begin{aligned} \rho \frac{DE}{Dt} = & -\text{div}(\rho \mathbf{u}) + \left(\frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} \right) \\ & + \left(\frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \right) + \text{div}(-k \text{grad} T) + S_E \end{aligned} \quad (1.14)$$

gdje je:

$$E = i + \frac{1}{2} (u^2 + v^2 + w^2) \quad (1.15)$$

Ekstrakcijom promjene (mehaničke) kinetičke energije dobiva se jednažba unutarnje energije i ili temperature T .

Dio energetske jednadžbe koji se odnosi na kinetičku energiju dobiva se množenjem jednadžbe količine gibanja u x smjeru sa komponentom brzine u i analogno za y i z smjer (množenje komponentnih jednadžbi količine gibanja sa odgovarajućim komponentama vektora brzina), te sumacijom rezultata. Time se dobiva jednadžba očuvanja kinetičke energije (2):

$$\rho \frac{D \left[\frac{1}{2} (u^2 + v^2 + w^2) \right]}{Dt} = -\mathbf{u} \cdot \text{grad} p + u \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) + v \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right) + w \left(\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) + \mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_M \quad (1.16)$$

Oduzimanjem (1.16) od (1.15) i definiranjem novog člana izvora $S_i = S_E - \mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_M$ dobiva se jednadžba unutrašnje energije (1.17):

$$\rho \frac{Di}{Dt} = -p \text{div} \mathbf{u} + \text{div} (k \text{grad} T) + \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{yx} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{zx} \frac{\partial u}{\partial z} + \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_{zy} \frac{\partial v}{\partial z} + \tau_{xz} \frac{\partial w}{\partial x} + \tau_{yz} \frac{\partial w}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial w}{\partial z} + S_i \quad (1.17)$$

U slučaju nestišljive tekućine imamo $i = cT$ (c - specifična toplina) te vrijedi: $\text{div} \mathbf{u} = 0$. To nam omogućuje reduciranje jednadžbe (1.17) na oblik temperaturne jednadžbe (1.18):

$$\rho c \frac{DT}{Dt} = \text{div} (k \text{grad} T) + \tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + \tau_{yx} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{zx} \frac{\partial u}{\partial z} + \tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} + \tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_{zy} \frac{\partial v}{\partial z} + \tau_{xz} \frac{\partial w}{\partial x} + \tau_{yz} \frac{\partial w}{\partial y} + \tau_{zz} \frac{\partial w}{\partial z} + S_i \quad (1.18)$$

1.3.1. Jednadžbe stanja

Gibanje tekućine u tri smjera je opisano sustavom od pet parcijalnih diferencijalnih jednadžbi : očuvanja mase, x, y, z -očuvanja količine gibanja i jednadžbe energije. Među nepoznicama pojavljuju se četiri termodinamičke varijable: ρ, p, i te T .

Odnosi između termodinamičkih varijabli mogu se promatrati kroz pretpostavku termodinamičke ravnoteže. Za opis stanja supstance u termodinamičkoj ravnoteži potrebno je poznavati samo dvije varijable.

Jednadžbe stanja povezuju druge varijable sa poznatim variablama. Ukoliko se primjerice koriste ρ i T kao varijable sa poznatim vrijednostima moguća je uspostava jednadžbi stanja za tlak p i specifičnu unutarnju energiju i :

$$p = p(\rho, T) \quad i = i(\rho, T) \quad (1.19a,b)$$

Za savršeni plin od koristi su poznate jednadžbe stanja:

$$p = \rho RT \quad i = C_V T \quad (1.20a,b)$$

Usvajanjem pretpostavke o termodinamičkoj ravnoteži eliminira se potreba za definiranjem izraza za sve pojedinačne varijable, osim dvije.

U strujanju stišljive tekućine jednadžbe stanja daju poveznicu između energetske jednadžbe s jedne strane i jednadžbe očuvanja mase i količine gibanja s druge strane. Ta poveznica pojavljuje se zbog moguće varijacije gustoće uslijed varijacije tlaka i temperature u polju strujanja.

Kapljevine i plinovi koje struje s malim brzinama ponašaju se kao nestišljive tekućine. Bez varijacije gustoće ne postoji veza između energetske jednadžbe i jednadžbi očuvanja mase i količine gibanja. Tada je za rješavanje strujnog polja dovoljno razmatrati jednadžbe očuvanja mase i količine gibanja. Energetska jednadžba uključuje se u analizirani sustav jednadžbi samo u slučaju prisustva izmjene topline.

2. Navier-Stokes jednadžba za Newton-ovu tekućinu

U osnovnim jednadžbama kao nepoznanice pojavljuju se i komponente viskoznog napreznja τ_{ij} . Zbog toga se uvodi odgovarajući model opisa viskoznih napreznja τ_{ij} . U mnogim tokovima viskozna napreznja mogu se opisati kao funkcije rate lokalne deformacije ili rate napreznja. U trodimenzionalnom strujanju lokalna rata deformacije je sadržana od rate linearne deformacije i volumne rate deformacije.

Svi plinovi i mnoge kapljevine su izotropni . U nastavku se usvaja pretpostavka izotropnosti promatrane tekućine.

Rata linearne deformacije elementa tekućine ima devet komponenata u tri dimenzije. Šest ih je neovisno u izotropnim tekućinama te je uobičajena primjena simbolnih oznaka s_{ij} . Tri linearne komponente deformacija u smjeru koordinatnih osi su:

$$s_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad s_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad s_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z} \quad (2.1a,b,c)$$

Za šest linearnih komponenti posmičnih deformacija koriste se izrazi:

$$s_{xy} = s_{yx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad s_{xz} = s_{zx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \quad s_{yz} = s_{zy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \quad (2.2a,b,c)$$

Volumna deformacija je opisana sa:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = \text{div } \mathbf{u} \quad (2.3a,b,c)$$

U Newton-ovim tekućinama viskozna napreznja su tretirana kao proporcionalana ratama deformacija (brzinama deformacija). Trodimenzionalna forma Newton-ovog zakona viskoznosti za strujanje stišljive tekućine uvlači dvije konstante proporcionalnosti: dinamička viskoznost μ (poveznica napreznja i linearnih deformacija) i sekundarna viskoznost λ (poveznica napreznja i volumne deformacije). Devet komponenti viskoznih napreznja, od kojih je šest neovisno su:

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad \tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \quad \tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \quad (2.4a,b,c)$$

$$\tau_{xx} = 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \text{div } \mathbf{u} \quad \tau_{yy} = 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \text{div } \mathbf{u} \quad \tau_{zz} = 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} + \lambda \text{div } \mathbf{u} \quad (2.4d,e,f)$$

O sekundarnoj viskoznosti λ ne zna se puno zbog njezinog malog efekta u problemima praktične prirode. Pokazalo se da je u analizi strujanja plinova zadovoljavajuće točna aproksimacija definirana sa: $\lambda = (-2/3) \mu$.

Ukoliko se promatra slučaj nestišljive tekućine vrijedi $\text{div} \mathbf{u} = 0$, a viskozna naprezanja jednaka su dvostrukoj lokalnoj rati linearnih deformacija množenoj s dinamičkom viskoznosti. Supstitucijom posmičnih naprezanja u x, y, z komponentama jednadžbe očuvanja količine gibanja dobiva se sustav tzv. Navier–Stokes jednadžbi:

$$\begin{aligned} \rho \frac{Du}{Dt} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \text{div} \mathbf{u} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + S_{Mx} \\ \rho \frac{Dv}{Dt} &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[2\mu \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \text{div} \mathbf{u} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] + S_{My} \quad (2.5a,b,c) \\ \rho \frac{Dw}{Dt} &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[2\mu \frac{\partial w}{\partial z} + \lambda \text{div} \mathbf{u} \right] + S_{Mz} \end{aligned}$$

Uobičajena je manipulacija viskoznih naprezanja na sljedeći način (y, z analogno):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \text{div} \mathbf{u} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} (\lambda \text{div} \mathbf{u}) \right] \\ &= \text{div}(\mu \text{grad} u) + [S_{Mx}] \quad (2.6) \end{aligned}$$

Kako bi se pojednostavili izrazi za očuvanje količine gibanja, članovi s manjim doprinosom (u uglatim zagradama) pripisuju se članovima viskoznog naprezanja u izvorima količine gibanja. Time se definira novi oblik izvora $S_M = S_M + [S_M]$ u Navier–Stokes jednadžbama. Prikazana forma pogodna je za primjenu metode konačnih volumena (detaljnije objašnjena u poglavljima koje slijede):

$$\begin{aligned} \rho \frac{Du}{Dt} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \text{div}(\mu \text{grad} u) + S_{Mx} \\ \rho \frac{Dv}{Dt} &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \text{div}(\mu \text{grad} v) + S_{My} \quad (2.7a,b,c) \\ \rho \frac{Dw}{Dt} &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \text{div}(\mu \text{grad} w) + S_{Mz} \end{aligned}$$

Ukoliko se koristi Newton-ov model za viskozna naprezanja, jednadžba unutrašnje energije nakon nekoliko koraka sređivanja poprima oblik:

$$\rho \frac{Di}{Dt} = -p \operatorname{div} \mathbf{u} + \operatorname{div}(k \operatorname{grad} T) + \Phi + S_i \quad (2.8)$$

Efekti koji nastaju uslijed viskoznih naprezanja opisani su disipacijskom funkcijom Φ u gornjoj jednadžbi unutarnje energije, koja nakon nekoliko koraka algebarske manipulacije, poprima sljedeći oblik:

$$\Phi = \mu \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 \right] \right\} + \lambda (\operatorname{div} \mathbf{u})^2$$

(2.9)

Disipacijska funkcija je uvijek pozitivna zbog kvadratnih članova te predstavlja izvor unutrašnje energije uslijed rada na deformaciji fluidne čestice. Taj rad je ekstrahiran iz mehaničke energije, koja uzrokuje gibanje, i konvertiran je u unutarnju energiju topline.

2.1. Konzervativni oblik jednadžbi strujanja tekućine

Konzervativna ili divergentna forma sustava jednadžbi kojom se opisuje vremenska ovisnost trodimenzionalnog strujanja tekućine i izmjene topline stišljive Newton-ove tekućine glasi:

$$1. \text{ očuvanje mase: } \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.10a)$$

$$2. \text{ očuvanje količine gibanja: } \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \mathbf{u}) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} u) + S_{MX} \quad (2.10b)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v \mathbf{u}) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} v) + S_{MY} \quad (2.10c)$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho w \mathbf{u}) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} w) + S_{MZ} \quad (2.10d)$$

$$3. \text{ očuvanje energije: } \frac{\partial(\rho i)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho i \mathbf{u}) = -p \operatorname{div} \mathbf{u} + \operatorname{div}(k \operatorname{grad} T) + \Phi + S_i \quad (2.10e)$$

$$4. \text{ jednadžbe stanja: } p = p(\rho, T) \quad ; \quad i = i(\rho, T) \quad (2.10f,g)$$

Potrebno je naglasiti da pretpostavka termodinamičke ravnoteže nadopunjuje pet parcijalnih diferencijalnih jednadžbi strujanja sa daljnje dvije algebarske jednadžbe. Uvođenje Newton-ovog modela za opis viskoznih naprezanja u vidu gradijenata komponenti vektora brzine rezultira sa sustavom od sedam jednadžbi i sedam nepoznanica.

Obzirom da je na raspolaganju dovoljan broj jednadžbi u odnosu na nepoznanice sustav je matematički zatvoren, odnosno moguće ga je riješiti uz primjenu odgovarajućih početnih i rubnih uvjeta.

3. Diferencijalna i integralna forma opće jednačbe pronosa

Primjećuju se određene sličnosti između različitih jednačbi očuvanja. Ukoliko se uvede opća varijabla ϕ , konzervativna forma svih jednačbi strujanja tekućine, uključujući jednačbe za skalarnu veličinu poput temperature ili koncentracije itd., može se pisati u slijedećoj formi (tzv. jednačbe pronosa za svojstvo tekućine ϕ):

Rata prirasta ϕ u elementu tekućine	+	ukupna rata protoka ϕ van iz elementa tekućine	=	rata povećanja ϕ uslijed difuzije	+	rata povećanja ϕ zbog djelovanja izvora
---------------------------------------------	---	-----------------------------------------------------------	---	-------------------------------------------	---	----------------------------------------------------

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho\phi\mathbf{u}) = \text{div}(\Gamma \text{grad}\phi) + S_\phi \quad (3.1)$$

Član **rate promjene** i **konvektivni član** su sa lijeve strane dok su članovi **difuzije** (Γ = koeficijent difuzije) i **član izvora** na desnoj strani.

Postavljenjem ϕ jednakim 1, zatim jednakim u, v, w te jednakim i (ili T) i izborom odgovarajućih vrijednosti za koeficijent difuzije Γ i član izvora, dobiva se posebna forma jednačbi za svaku od pet PDJ za očuvanje mase, količine gibanja i energije.

Potrebno je naglasiti da integracija jednačbi pronosa za svojstvo ϕ (jednačba 3.1) preko trodimenzionalnog kontrolnog volumena (CV) predstavlja upravo ključni korak u metodi konačnih volumena:

$$\int_{CV} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_{CV} \text{div}(\rho\phi\mathbf{u}) dV = \int_{CV} \text{div}(\Gamma \text{grad}\phi) dV + \int_{CV} S_\phi dV \quad (3.1)$$

Volumni integral drugog člana lijeve strane (konvektivni član) i prvog člana desna strane (član difuzije) pisani su u formi integrala preko oplošnih površina (granica) kontrolnog volumena primjenom Gauss-ovog divergentnog teorema. Primjenom Gauss-ovog divergentnog teorema na vektor \mathbf{a} definirana je jednakost:

$$\int_{CV} \text{div}(\mathbf{a}) dV = \int_A \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.3)$$

Fizikalna interpretacija člana n.a je ta da se promatra komponenta vektora \mathbf{a} u smjeru vektora vanjske normale \mathbf{n} na segment kontrolne površine dA . Prema tome, integral divergencije vektora \mathbf{a} po volumenu je jednak komponenti vektora \mathbf{a} u smjeru vanjske normale na element oplošja volumena sa integracijom po cijeloj oplošnoj površini A .

Primjenom Gauss-ovog divergentnog teorema, jednačba (1) može se zapisati na način :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{CV} \rho \phi dV \right) + \int_A (\rho \phi \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} dA = \int_A (\Gamma \text{grad} \phi) \cdot \mathbf{n} dA + \int_{CV} S_\phi dV \quad (3.4)$$

Rata prirasta ϕ unutar kontrolnog volumena	+	Ukupna rata smanjenja ϕ uslijed konvekcije kroz oplošje kontrolnog volumena	=	Ukupna rata povećanja ϕ uslijed difuzije kroz oplošje kontrolnog volumena	+	Ukupna rata proizvodnje ϕ unutar kontrolnog volumena
-------------------------------------------------------	---	-------------------------------------------------------------------------------------------	---	-----------------------------------------------------------------------------------------	---	--------------------------------------------------------------------

Redosljed integracije i diferencijacije promijenjen je u slučaju prvog člana lijeve strane kako bi se ilustriralo njegovo fizikalno značenje (rata promjene ukupne količine svojstva tekućine ϕ u kontrolnom volumenu).

U stacionarnim problemima član rate promjene je jednak nuli, što vodi do integralne forme stacionarne jednačbe pronosa:

$$\int_A \mathbf{n} \cdot (\rho \phi \mathbf{u}) dA = \int_A \mathbf{n} \cdot (\Gamma \text{grad} \phi) dA + \int_{CV} S_\phi dV \quad (3.5)$$

U nestacionarnim problemima također je potrebno provesti integraciju po vremenu t kroz mali vremena inkrement Δt , od t do $t + \Delta t$. Time se dobiva najopćenitija forma jednačbe pronosa:

$$\int_{\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{CV} \rho \phi dV \right) dt + \int_{\Delta t} \int_A \mathbf{n} \cdot (\rho \phi \mathbf{u}) dA dt = \int_{\Delta t} \int_A \mathbf{n} \cdot (\Gamma \text{grad} \phi) dA dt + \int_{\Delta t} \int_{CV} S_\phi dV dt \quad (3.6)$$

4. Klasifikacija po fizikalnim karakteristikama

Koncentriramo pažnju na pitanja početnih i rubnih uvjeta koji su potrebni za iznalaženje matematičkog modela strujanja tekućina. Razlikujemo dvije principijalne kategorije fizikalnih karakteristika: situacije stacionarnog stanja (problemi ravnoteže) i nestacionarnog stanja (eng: marching problems).

Stacionarni problemi opisuju se **eliptičnim jednadžbama**. Tipičan primjer eliptične jednadžbe je Laplaceova jednadžba kojom se opisuje bezvrtložno strujanje nestišljive tekućine i stacionarna stanja pronosa mase. Za dvodimenzionalni problem jednadžba glasi:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (4.1)$$

Jednostavan primjer problema ravnoteže je stacionarno stanje raspodjele koncentracije otopljene tvari (gdje je $\phi = c$) u izoliranoj cijevi uz odsustvo strujanja, koja na rubovima $x = 0$ i $x = L$ ima vremenski konstantne i međusobno različite koncentracije c_0 and c_L . Jednodimenzionalni problem opisan je jednadžbom:

$$D \frac{d^2 c}{dx^2} = 0 \quad (4.2)$$

Uz poznavanje odgovarajućih rubnih uvjeta raspodjelu koncentracija u x smjeru biti će pravac (slika 4.1). Jedinstveno rješenje za taj i sve eliptičke probleme može se dobiti specifikacijom uvjeta za zavisnu varijablu (u ovom slučaju koncentracija ili derivacija toka mase otopljene tvari) na svih rubovima prostorne domene rješenja. Problemi koji zahtijevaju poznavanje podataka uzduž cjelokupnog ruba nazivaju se **problemi rubnih uvjeta**.

Važna karakteristika eliptičkih problema je ta da poremećaj unutar domene rješenja (npr. promjena koncentracije uslijed pojave izvora mase otopljene tvari sa odgovarajućom koncentracijom) izmjenjuje rješenje na cijelom području rješenja. Poremećajni signal se širi u svim smjerovima unutar domene rješenja. Posljedično, rješenja fizikalnih problema opisanih sa eliptičnim jednadžbama su uvijek glatka, čak i u slučaju prisustva diskontinuiteta na području rubnih uvjeta. Kako bi se osiguralo da se informacije šire u svim smjerovima, numeričke tehnike za rješavanje eliptičkih problema moraju dozvoliti da se događaj u svakoj proračunskoj točki nalazi pod utjecajem svih susjednih točaka.

Tranzijentna izmjena mase ili topline, sva nestacionarna strujanja i valna fenomenologija su opisane sa paraboličkim i hiperboličkim jednadžbama.

Paraboličkim jednadžbama opisuju se nestacionarni problemi koji uključuju značajniji doprinos difuzije. Primjeri su nestacionarno viskozno strujanje, nestacionarni pronos otopljene tvari ili nestacionarno vođenje topline uz odsustvo strujanja. Prototip parabolične jednadžbe je jednadžba difuzije:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (4.3)$$

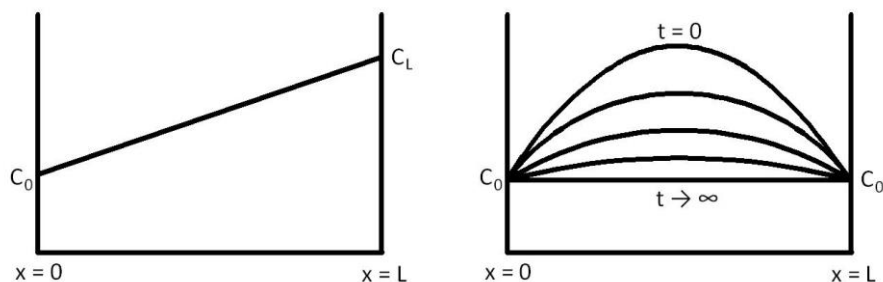
Za primjer se promatra tranzijentna promjena raspodjele koncentracija ($\phi = c$) uzduž izolirane cijevi. Inicijalna raspodjela koncentracija je usvojena kao parabola s maksimumom na polovici cijevi $x = L/2$ (momentalno nisu bitni razlozi takve inicijalne raspodjele). Ukoliko se nakon vremena $t = 0$ na rubovima cijevi $x = 0$ i $x = L$ zadržavanju jednake i konstantne koncentracije c_0 , adekvatan opis problema dan je difuznom jednadžbom:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (4.4)$$

Konačna stacionarna razdioba temperature je jednolika $c = c_0$ uzduž cijevi (slika 4.1).

Rješenje difuzne jednadžbe je eksponencijalno zamiranje inicijalne parabolične raspodjele koncentracije. Potrebni su početni uvjeti za cijelu cijev i uvjeti na svim rubovima za cjelokupni vremenski period $t > 0$. Takav tip problema se naziva **problem početnih i rubnih uvjeta**.

Poremećaj u točki unutar domene rješenja ($0 < x < L$ i vremena $t_1 > 0$) može utjecati jedino na događaje u kasnijem periodu $t > t_1$ (rješenje se pomiče unaprijed u vremenu te se difuzno širi u prostoru).

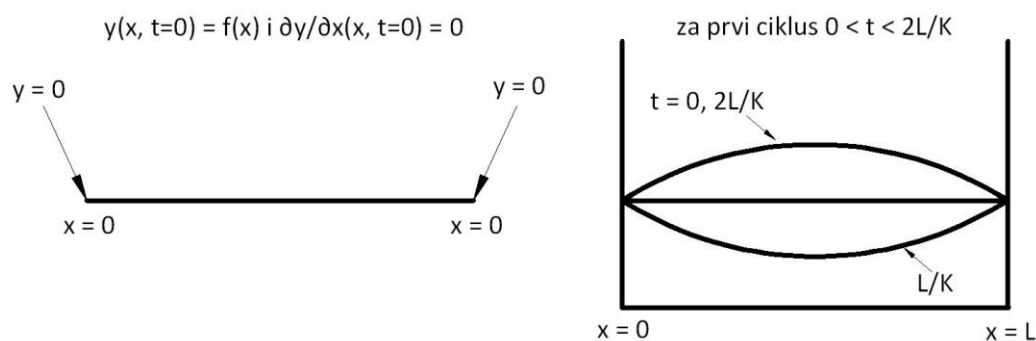


Slika 4.1 Stacionarni (lijevo) i tranzijentni (desno) slučaj raspodjele koncentracija otopljene tvari u cijevi uz zadane rubne uvjete (eliptični problem, lijevo) te početne i rubne uvjete (parabolički problem, desno)

Hiperbolne jednadžbe dominiraju u analizi problema oscilacija. Pojavljuju se u opisu nestacionarnih procesa sa zanemarivo malim utjecajem energetske disipacije. Tipična hiperbolna jednadžba je valna jednadžba:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = K^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (4.5)$$

Gornja forma jednačbe primjerice opisuje transferzalni pomak ($\phi = y$) napregnute žice tijekom oscilacija sa malim amplitudama ili akustičke oscilacije. Konstanta K u tom slučaju predstavlja brzinu vala (slika 4.2).



Slika 4.2 Transferzalni pomak napregnute žice u definiranju početnih i rubnih uvjeta (hiperbolni problem)

Rješenje valne jednačbe i drugih hiperbolnih jednačbi dobiva se specificiranjem dva početna uvjeta za pomak žice y te jednog rubnog uvjeta na svim rubovima (granicama) za vrijeme $t > 0$. Prema tome, hiperbolni problemi su također **problemi početnih i rubnih uvjeta**.

$$y(x, t) = a \cos\left(\frac{\pi K t}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (4.6)$$

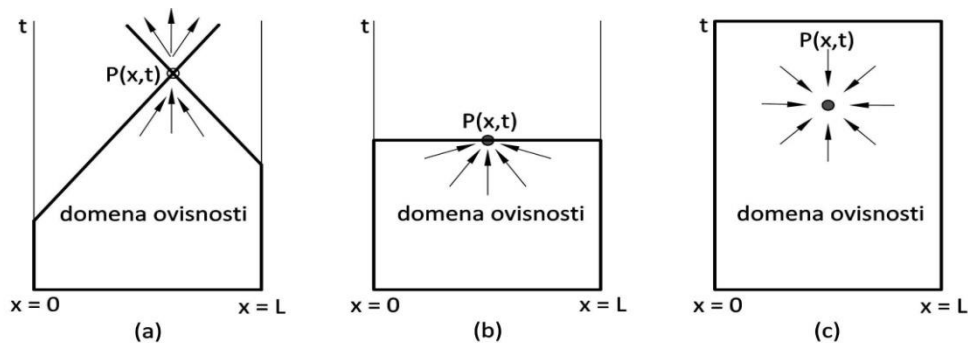
Rješenje ukazuje na konstantnost amplitude, odnosno nepostojenje sile prigušenja. Odsustvo prigušenja ima za posljedicu da se inicijalno prisutni diskontinuiteti zadržavaju tijekom vremena $t > 0$.

Poremećaj u točki utječe na rješenje samo u ograničenom dijelu prostora. Brzina propagacije poremećaja u hiperbolnim problemima je konačna i jednaka valnoj brzini K . Za usporedbu, u paraboličnim i eliptičnim problemima pretpostavlja se beskonačna brzina propagacije.

Za točke vrlo bliske x osi domena ovisnosti je zatvorena sa dvije karakteristika koje imaju izvorište u točki koja se nalazi na x osi (slika 4.3a). Karakteristike kroz točku P presijecaju rubove (granice) problema. Domena ovisnosti o P je zatvorena sa te dvije karakteristike te linijama $t = 0$, $x = 0$ i $x = L$.

Oblik domene ovisnosti u paraboličkim (slike 4.3b) i eliptičnim (slike 4.3c) problemima je različita zbog pretpostavke širenja informacija sa beskonačnom brzinom. Deblje linije (rubovi

pojedinih domena ovisnosti) definiraju područja za koja su potrebni početni i/ili rubni uvjeti da bi se omogućilo generiranje rješenja u točki $P(x,t)$.



Slika 4.2 Transferzalni pomak napregnute žice u definiranje početnih i rubnih uvjeta (hiperbolni problem)

Način na koji promjena u pojedinoj točki djeluje na druge točke ovisi o tome da li promatrani fizikalni problem predstavlja stacionarni ili tranzijentni fenomen te da li je brzina propagacije poremećaja konačna ili beskonačna.

Navedeno rezultira sa klasifikacijom fizikalnih karakteristika i podjelom PDJ u eliptične, parabolne ili hiperbolne.

Praktična metoda klasifikacije PDEs je izvedena za opći slučaj PDJ drugog reda u dvije dimenzije x and y :

$$a \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + d \frac{\partial \phi}{\partial x} + e \frac{\partial \phi}{\partial y} + f \phi + g = 0 \quad (4.7)$$

Pretpostavlja se da je jednačba linearna sa koeficijentima a, b, c, d, e, f i g danim kao konstantama. Klasifikacija PDJ je provedena u smislu ponašanja derivacije najvišeg reda, pa shodno tome promatramo samo članove derivacije drugog reda. Klasa PDJ drugog reda može se identificirati putem iznalaženja mogućeg jednostavnog harmonijskog (valnog) rješenja. Ukoliko ona postoje radi se o hiperboličkoj jednačbi. Ukoliko ne, jednačba je parabolička ili eliptična.

Jednostavno valno rješenje pojavljuje se u slučaju da karakteristična jednačba ima dva realna korijena:

$$a \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 - b \left(\frac{dy}{dx} \right) + c = 0 \quad (4.8)$$

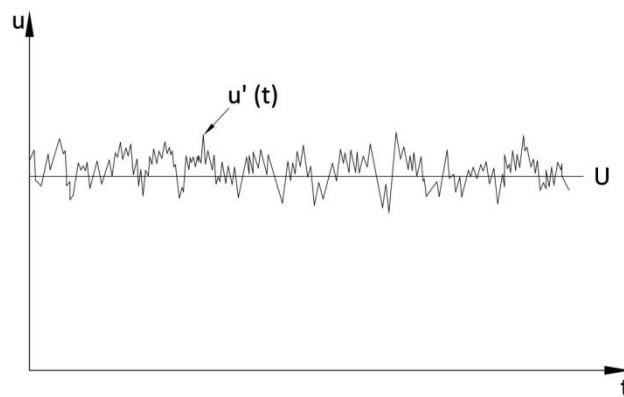
Postojanje i broj realnih rješenja karakteristične jednadžbe ovisi o vrijednosti diskriminante ($b^2 - 4ac$). Razlikujemo tri slučaja (tablica 4.1).

Tablica 4.1 karakterizacija jednadžbi prema broju realnih rješenja diskriminante ($b^2 - 4ac$)

$b^2 - 4ac$	Tip jednadžbe	Karakteristike
> 0	Hiperbolni	Dvije realne
$= 0$	Parabolni	Jedna realna
< 0	Eliptični	Nema karakteristika

5. Modeli turbulencije

Reynoldsov broj daje mjeru relativne važnosti inercionih sila (povezanih sa efektima konvekcije) i viskoznih sila. Ekperimentalnom djelatnosti pokazalo se da strujanje pri vrijednostima Reynoldsovog broja manjeg od tzv. kritičnog Re_{krit} ima odlike nemiješanja između međusobnih slojeva (lamina). Taj režim se naziva **laminaran**. Pri vrijednostima Reynolds-ovog broja iznad Re_{krit} pojavljuje se složeni niz događaja koji u načelu vodi do radikalne promjene karaktera strujanja. U konačnom stadiju strujanje se ponaša kao kaotično i slučajno. Takovo gibanje je u osnovi nestacionarno čak i u uvjetima uspostavljenih konstantnih rubnih uvjeta. Brzina i svi ostali parametri toka variraju na način koji je kaotičan i slučajan pa se takav režim strujanja naziva **turbulentnim**.



Slika 5.1 Primjer izmjerene vremenske serije brzina u točki turbulentnog strujnog polja

Slučajna priroda turbulentnog strujanja potrebuje neki “ekonomičan” opis gibanja svih čestica tekućine. Na slici je prikazana dekompozicija stvarne brzine $u(t)$ u nekom trenutku vremena na stacionarnu srednju vrijednost brzine U i fluktuirajuću komponentu $u'(t)$ te vrijedi: $u(t) = U + u'(t)$. Takav tretman naziva se **Reynolds –ova dekompozicija**. Svi parametri toka mogu se karakterizirati na isti način, u smislu srednjih vrijednosti (U, V, W, P itd.) i neke statističke karakteristike fluktuirajuće komponente (u', v', w', p' itd.).

Čak i u tokovima u kojima srednja brzina i tlakovi variraju samo u jednoj ili dvije dimenzije, turbulentne fluktuacije uvijek imaju 3D karakter. Vizualizacija turbulentnog strujanja potvrdila je rotacionu strukturu toka odnosno prisustvo turbulentnih vrtloga (eng: turbulent eddies), sa širokim rasponom mjerila duljina. Čestice koje su inicijalno prostorno separirane na relativno velikoj udaljenosti mogu se potpuno približiti sa vrtložnim gibanjem (i obratno). To upućuje na prisustvo vrlo efikasnog mehanizma izmjene topline, mase ili količine gibanja. Primjerice, unošenje boje u nekoj točki turbulentnog toka ukazuje na rapidno disperziranje i smanjenje inicijalnog intenziteta boje po cijelom području strujanja. Takvo efektivno miješanje upućuje na visoke vrijednosti koeficijenta difuzije za masu, količinu gibanja i toplinu.

Najveći turbulentni vrtlozi ekstrahiraju energiju iz “osrednjenog” toka kroz proces zvan **vtložno rastezanje (eng: vortex stretching)**. Prisustvo gradijenta u profilima brzina osrednjenog strujanja distordira rotirajuće turbulentne vrtloge odnosno vrtlozi se deformiraju zbog prisile na brže gibanje jednog dijela vrtloga od drugog.

Karakteristična brzina ϑ i karakteristična duljina većih vrtloga su istog reda veličine kao i mjera brzine U i mjera duljine L osrednjenog strujanja. Zbog toga Reynoldsov broj za “velike vrtloge” $Re = \vartheta/\nu$ (odnos mjerila vrtloga i kinematske viskoznosti) poprima velike vrijednosti u turbulentnim tokovima, slično kao i sam $Re = UL/\nu$. Time se ukazuje i na dominaciju inercionih efekata nad zanemarivim viskoznim efektima.

Prema tome, strujanje u zoni velikih vrtloga se zbog dominacije inercije i minornog utjecaja viskoznosti može shvatiti kao bezviskozno a količina momenta ostaje konzervirana u procesu rastezanja vrtloga. Nadalje, to uzrokuje povećanje rate rotacije i istovremeno smanjenje radijusa poprečnog presjeka vrtloga. Takvim procesom generira se gibanje na manjoj transferzalnoj prostornoj skali i manjoj vremenskoj skali. Pri rastezanju vrtloga rad izvršen od strane osrednjenog toka na velike vrtloge tijekom opisanog procesa osigurava energiju potrebnu za održavanje turbulencije.

Manji vrtlozi su dominantno deformirani (rastegnuti) od strane nešto većih vrtloga i manje intenzivno od strane osrednjenog strujanja. Na taj način se kinetička energija velikih vrtloga predaje na progresivno sve manje i manje vrtloge (tzv. **energetska kaskada**).

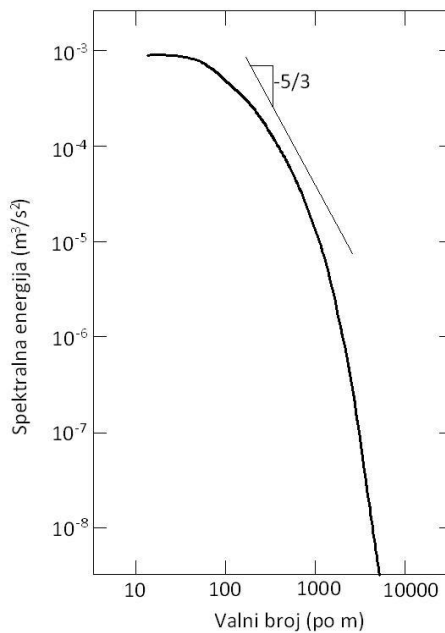
Sve fluktuirajuće komponente turbulentnog toka sadrže energiju u širokom rasponu frekvencija ili valnih brojeva ($= 2\pi f/U$ gdje je f oznaka za frekvenciju). Primjer energetskog spektra turbulencije za strujanje iza fine rešetke prikazan je na slici 5.2.

Spektralna energija $E(K)$ je funkcija valnog broja $K=2\pi/\lambda$ (λ je valna duljina vrtloga). Spektralna energija $E(K)$ je kinetička energija po jedinici mase za jedinični valni broj fluktuacija oko valnog broja k .

Dijagram ukazuje na prisustvo vršne vrijednosti u području malih valnih brojeva, odnosno na činjenicu da veliki vrtlozi sadrže najviše energije. Oni primaju energiju kroz snažnu interakciju sa osrednjenim strujanjem. Vrijednost $E(K)$ se rapidno smanjuje pri povećanju valnog broja pa najmanji vrtlozi imaju najmanji energetska sadržaj.

U tipičnim inženjerskim problemima najmanja mjerila gibanja u turbulentnom toku imaju duljine reda veličine od 0.1 to 0.01 mm i frekvencije oko 10 kHz, pri čemu dominira viskoznost. Reynoldsov broj Re_η za najmanje vrtloge temelji se na njihovim karakterističnim brzinama ϑ i karakterističnim duljinama η te poprima vrijednost $Re_\eta = \vartheta\eta/\nu = 1$. Prema tome

najmanja mjerila prisutna u turbulentnim tokovima su ona u kojima i efekti inercije i efekti viskoznosti imaju podjednaku važnost.



Slika 5.2 Energetski spektar turbulencije za stujanje iza fine rešetke

Ta mjerila nazivaju se Kolmogorov-a mikro mjerila, pri kojima se rad ulaže u svladavanje viskoznih naprezanja. Zaključno, energija vezana uz gibanje malih vrtloga je disipirana odnosno prenesena u termalnu unutrašnju energiju. Disipacija rezultira sa povećanim gubicima mehaničke energije u turbulentnim tokovima.

Najveći vrtlozi su izraženo anizotropni (fluktuacije su različite u različitim smjerovima) i nalaze se pod snažnim utjecajem rubnih uvjeta. Pri velikim Reynolds-ovim brojevima osrednjenog strujanja najmanji vrtlozi u turbulentnom toku su izotropni.

Kolmogorov je izveo univerzalnu spektralnu karakteristiku vrtloga srednjih veličina, koji su dovoljno veliki da doprinos viskoznosti ostaje zanemariv (kao i kod velikih vrtloga), ali istovremeno dovoljno mali da se detalji njihovog ponašanja mogu izraziti kao funkcija rate energetske disipacije ε (kao kod malih vrtloga). Odgovarajuće mjerilo duljina za te vrtloge je $1/k$, a njihova spektralna energija u tom inercionom podpodručju (eng: "inertial subrange") može se izraziti s:

$$E(K) = \alpha K^{-5/3} \varepsilon^{2/3} \tag{5.1}$$

Mjerenja su pokazala da konstanta α poprima vrijednost ≈ 1.5 . Na dijagramu spektralne energije (slika 5.2) ucrtana je linija sa nagibom $-5/3$ a prema izmjerenim rezultatima je razvidno da separacija mjerila nije dostatna za "čisto" inerciono podpodručje. Preklapanje između velikih i malih vrtloga je locirano oko vrijednosti $K \approx 1000$.

Sve varijable strujanja (komponente brzine, tlak, temperatura, gustoća itd.) iskazuju se kao vremenski zavisne. Reynolds-ova dekompozicija $\varphi(t) = \Phi + \varphi'(t)$ definira karakteristiku toka φ u točki kao sumu stacionarne osrednjene komponente Φ i vremenski promjenljive odnosno fluktuirajuće komponente $\varphi'(t)$ sa srednjom (osrednjenom) vrijednosti 0. Osrednjena vrijednost Φ karakteristike strujanja φ je definirana izrazom 5.2a a vremenski osrednjena vrijednost fluktuacija izrazom 3 (5.2b):

$$\overline{\varphi'} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \varphi'(t) dt \quad ; \quad \Phi = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \varphi(t) dt \quad (5.2s,b)$$

Pri stacionarnom osrednjenom strujanju granica vremenskog intervala Δt trebala bi težiti beskonačnosti, no proces opisan jednadžbom daje smislaone vremenski osrednjene vrijednosti i kada je Δt veći od mjerila vremena najsporije varijacije karakteristike φ kod najvećih vrtloga.

Najkompaktniji opis osnovnih karakteristika fluktuirajućih komponenti turbulentnog strujanja dan je u statističkom smislu. Opis primijenjen za odstupanje fluktuacije φ' oko osrednjene vrijednosti Φ su **varijanca** i **korijen srednjeg kvadrata odstupanja** (eng: root mean square - r.m.s.):

$$\overline{\varphi'} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \varphi'(t) dt \quad ; \quad \varphi_{rms} = \sqrt{(\overline{\varphi'^2})} = \left[\frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \varphi'(t)^2 dt \right]^{1/2} \quad (5.3s,b)$$

R.m.s. vrijednosti komponenti brzine su od posebnog značenja zbog njihovog relativno jednostavnog eksperimentalnog registriranja te značenja prosječnog (osrednjenog) intenziteta fluktuacije brzina. Varijance fluktuacije brzina koriste se u Navier-Stokes jednadžbi. One su proporcionalne protocima količine gibanja, induciranim s turbulentnim vrtlozima. Time se uzrokuju dodatna normalna naprezanja.

Ukupna turbulentna kinetička energija po jedinici mase k u nekoj točki definira se izrazom:

$$k = \frac{1}{2} (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}) \quad (5.4)$$

Intenzitet turbulencije T_i je srednji r.m.s. brzine podijeljen s referentnom srednjom brzinom strujanja U_{ref} te je vezan na turbulentnu kinetičku energiju k na slijedeći način:

$$T_i = \frac{\left(\frac{2}{3}k\right)^{1/2}}{U_{ref}} \quad (5.5)$$

Varijanca se također naziva drugi moment fluktuacija. Važan detalj strukture fluktuacija je sadržan u momentima sačinjenim od para različitih varijabli. Primjerice, promatramo karakteristike $\varphi = \Phi + \varphi'$ i $\psi = \Psi + \psi'$ sa $\overline{\varphi'}, \overline{\psi'} = 0$. Njihov **drugi moment** je definiran kao:

$$\overline{\varphi'\psi'} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \varphi'\psi' dt \quad (5.6)$$

Kada bi brzinske fluktuacije u različitim smjerovima bile neovisne i slučajne njihov drugi moment komponenti brzina $\overline{u'v'}, \overline{u'w'}, \overline{v'w'}$ bio bi jednak nuli. Turbulencija je povezana sa vrtložnom strukturom toka a inducirane brzinske komponente su kaotične, no ne i neovisne. Prema tome njihov drugi moment nije nula.

U vremenski osrednjenim Navier–Stokes jednadžbama članovi $\overline{u'v'}, \overline{u'w'}, \overline{v'w'}$ predstavljaju flukseve (protoke) turbulentnih količina gibanja koji su blisko povezani sa dodatnim posmičnim naprezanjima koja djeluju na element tekućine. Momenti tlaka i brzine $\overline{p'u'}, \overline{p'v'}$ itd. imaju ulogu u difuziji turbulentne energije.

Više detaljnih informacija o strukturi fluktuacija može se dobiti analizom odnosa između vrijednosti fluktuacija u različitim vremenskim terminima. **Autokorelacijska** funkcija $R_{\varphi'\varphi'}(\tau)$ definirana je izrazom:

$$R_{\varphi'\varphi'}(\tau) = \overline{\varphi'(t)\varphi'(t+\tau)} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \varphi'(t)\varphi'(t+\tau) dt \quad (5.7)$$

Slično tome, moguće je definirati daljnju **autokorelacijsku** funkciju $R_{\varphi'\varphi'}(\xi)$ temeljenu na dva mjerenje u istom terminu, na dvije pozicije sa određenim međusobnim razmakom:

$$R_{\varphi'\varphi'}(\xi) = \overline{\varphi'(\mathbf{x}, t)\varphi'(\mathbf{x} + \xi, t)} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \varphi'(\mathbf{x}, t')\varphi'(\mathbf{x} + \xi, t') dt' \quad (5.8)$$

Kada je vremenski pomak τ (ili prostorni pomak ξ) nula, vrijednost $R_{\varphi'\varphi'}$ korespondira varijanci i poprima najveću moguću vrijednost. Ponašanje fluktuacija φ' je kaotično u turbulentnom strujanju pa se može očekivati da fluktuacije pojačano gube korelaciju s $\tau \rightarrow \infty$ (ili $|\xi| \rightarrow \infty$). Stoga, vremenska ili prostorna autokorelacija gravitira nuli.

Vrtlozi u turbulenciji generiraju lokalnu strukturu u toku, pa će postojati korelacija vrijednosti φ' u trenutku t i nakon kraćeg vremena odnosno na određenoj lokaciji x i na malo udaljenoj lokaciji. Proces smanjenja korelacije odvija se graduirano kroz period trajanja tipičnog vrtloga ili na udaljenosti koja odgovara duljini tipičnog vrtloga. Analogno tome definira se **cross-**

correlation funkcija $R_{\varphi'\psi'}(\tau)$ obzirom na vremenski pomak τ ili $R_{\varphi'\psi'}(\xi)$ obzirom na prostorni pomak za par različitih fluktuacija (zamjena drugog φ' sa ψ' u prethodnim jednadžbama autokorelacije).

Turbulencija je generirana i održavana sa gradijentom brzina u profilu osrednjenog strujanja. Na mjestima većih gradijenata intenzitet statističkih obilježja turbulencije (poput r.m.s. brzinskih fluktuacija) je veći. Raspodjela brzinskih fluktuacija je anizotropna, s višom razinom fluktuacija u smjeru osrednjenog strujanja. Bez gradijenta brzina ili nekog alternativnog generatora turbulencije, turbulencija zamire i postaje više isotropna. U područjima blizu krute granice turbulentna struktura je dominantno pod utjecajem trenja s granicom (stjenkom) a zamiranje turbulentnih brzinskih fluktuacija okomito je na tu granicu.

5.1. Reynolds-ovo osrednjavanje Navier-Stokes jednadžbi za nestišljive tekućine (RANS)

U nastavku analiziramo posljedice prisustva turbulentnih fluktuacija u jednadžbama osrednjenog strujanja nestišljive tekućine konstantne viskoznosti. Jednakosti koje se koriste u vremenskom osrednjavanju fluktuirajućih karakteristika $\varphi = \Phi + \varphi'$ i $\psi = \Psi + \psi'$ pri njihovom zbrajanju, deriviranju i integriranju su:

$$\overline{\varphi'} = \overline{\psi'} = 0 \quad ; \quad \overline{\Phi} = \Phi \quad ; \quad \frac{\overline{\partial\varphi}}{\partial s} = \frac{\partial\Phi}{\partial s} \quad ; \quad \overline{\int\varphi ds} = \int\Phi ds \quad (5.9a,b,c,d)$$

$$\overline{\varphi' + \psi'} = \Phi + \Psi \quad ; \quad \overline{\varphi\psi} = \Phi\Psi + \overline{\varphi'\psi'} \quad ; \quad \overline{\varphi\Psi} = \Phi\Psi \quad ; \quad \overline{\varphi'\Psi} = 0 \quad (5.10a,b,c,d)$$

$$\overline{\text{div}\mathbf{a}} = \text{div}\mathbf{A} \quad ; \quad \overline{\text{div}(\varphi\mathbf{a})} = \text{div}(\overline{\varphi\mathbf{a}}) = \text{div}(\Phi\mathbf{A}) + \text{div}(\overline{\varphi'\mathbf{a}'}); \quad \overline{\text{div grad}\varphi} = \text{div grad}\Phi \quad (5.11a,b,c)$$

Razmatramo trenutne jednadžbe kontinuiteta (očuvanje mase) i Navier–Stokes jednadžbe (očuvanje količine gibanja) u kartezijevom koordinatnom sustavu. Vektor brzina \mathbf{u} ima komponente u, v, w u koordinatnim smjerovima x, y, z . Navedenim sustavom može se definirati svaki turbulentni tok (za slučaj bez djelovanja masenih sila).

$$\text{div}\mathbf{u} = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \text{div}(\text{grad}(u))$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{v}\mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \text{div}(\text{grad}(v)) \quad (5.12a,b,c,d)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{w}\mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \text{div}(\text{grad}(w))$$

Analiziramo efekt fluktuacija na osrednjeno strujanje primjenom Reynoldsove dekompozicije te zamjenom varijabli strujanja \mathbf{u} (odnosno u, v, w) i p sumom osrednjene i fluktuirajuće komponente:

$$\mathbf{u} = \mathbf{U} + \mathbf{u}' ; u = U + u' ; v = V + v' ; p = P + p' \quad (5.13a,b,c,d)$$

Razmatranjem jednadžbe kontinuiteta i primjenom pravila za vremensko osrednjavanje $\overline{\text{div} \mathbf{u}} = \text{div} \mathbf{U}$ dobiva se **jednadžba kontinuiteta osrednjenog strujanja**:

$$\text{div} \mathbf{U} = 0 \quad (5.14)$$

Sličan tretman provodi se na x komponenti jednadžbe očuvanja količine gibanja. Pojedini vremenski osrednjeni članovi u toj jednadžbi mogu se zapisati u formi:

$$\overline{\frac{\partial u}{\partial t}} = \frac{\partial U}{\partial t} ; \overline{\text{div}(\mathbf{u}\mathbf{u})} = \text{div}(\mathbf{U}\mathbf{U}) + \text{div}(\overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'}) \quad (5.15a,b)$$

$$-\overline{\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} ; \overline{\nu \text{div}(\text{grad}(u))} = \nu \text{div}(\text{grad}(U)) \quad (5.15c,d)$$

Supstitucija tih rezultata daje **vremenski osrednjenu x komponentu jednadžbe očuvanja količine gibanja**. Ponavljanje iste procedure na jednadžbama za y i z smjer daje **vremenski osrednjene y i z komponente jednadžbe očuvanja količine gibanja**:

$$\begin{aligned} \overline{\frac{\partial U}{\partial t}} + \text{div}(\mathbf{U}\mathbf{U}) + \text{div}(\overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'}) &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \text{div}(\text{grad}(U)) \\ (I) + (II) + (III) &= (IV) + (V) \end{aligned} \quad (5.16)$$

Članovi (I), (II), (IV) i (V) također se pojavljuju u "trenutnim" jednadžbama 5.12b,c,d i 15. Međutim, navedeni proces vremenskog osrednjavanja dovodi do uvođenja novog člana (III).

Član (III) sadrži umnožak fluktuirajućih brzina i povezan je sa konvektivnom izmjenom količine gibanja putem turbulentnih vrtloga. Uobičajena je praksa da se član (III) prenese na desnu stranu vremenski osrednjene jednadžbe u cilju naglašavanja njegove uloge kao dodatnih turbulentnih naprezanja za osrednjene komponente U, V i W (jednadžbe 5.17a,b,c)

Članovi dodatnog naprezanja rezultat su pojave dodatne tri normalne komponente naprezanja izražene jednadžbama 5.18a,b,c i tri posmične komponente naprezanja izražene jednadžbama 5.18c,d,e).

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{UU}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \text{div}(\text{grad}(U)) + \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial(-\rho \overline{u'^2})}{\partial x} + \frac{\partial(-\rho \overline{u'v'})}{\partial y} + \frac{\partial(-\rho \overline{u'w'})}{\partial z} \right] \quad (5.17a)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{VU}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \nu \text{div}(\text{grad}(U)) + \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial(-\rho \overline{u'v'})}{\partial x} + \frac{\partial(-\rho \overline{v'^2})}{\partial y} + \frac{\partial(-\rho \overline{v'w'})}{\partial z} \right] \quad (5.17b)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{WU}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \nu \text{div}(\text{grad}(W)) + \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial(-\rho \overline{u'w'})}{\partial x} + \frac{\partial(-\rho \overline{v'w'})}{\partial y} + \frac{\partial(-\rho \overline{w'^2})}{\partial z} \right]$$

(5.17c)

$$\tau_{xx} = -\rho \overline{u'^2} \quad ; \quad \tau_{yy} = -\rho \overline{v'^2} \quad ; \quad \tau_{zz} = -\rho \overline{w'^2} \quad (5.18a,b,c)$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = -\rho \overline{u'v'} \quad ; \quad \tau_{xz} = \tau_{zx} = -\rho \overline{u'w'} \quad ; \quad \tau_{yz} = \tau_{zy} = -\rho \overline{v'w'} \quad (5.18c,d,e)$$

Navedena turbulentna naprezanja nazivaju se **Reynolds-ova naprezanja**. Normalna naprezanja su ustvari varijance x, y i z komponente brzinske fluktuacije, te su uvijek veće od nule zbog kvadrata.

Posmična naprezanja sadrže druge momente povezane s korelacijom između različitih komponenti brzina. Korelacija između parova različitih brzinskih komponenti kroz strukturu vrtloga osigurava da **turbulentna posmična naprezanja** također ne mogu iznositi nula, te da su u turbulentnom toku uobičajeno puno veća od viskoznih naprezanja.

5.2. Proračun turbulentnih tokova

Postojeće metode za opis efekata i utjecaja turbulencije mogu se grupirati u slijedeće tri kategorije:

a) Turbulentni modeli za RANS jednadžbe

Fokus je dan na osrednjeno strujanje i utjecaj turbulencije na njegove karakteristike. Dodatni članovi pojavljuju se u osrednjenim jednadžbama toka kroz interakciju različitih turbulentnih fluktuacija. Ti dodatni članovi su modelirani sa klasičnim modelima turbulencije od kojih je najpoznatiji "k-ε". Za većinu inženjerskih problema nije potrebno razlučiti sve detalje turbulentnih fluktuacija budući da su korisnici u osnovi upućeni na informacije o vremenski osrednjenim karakteristikama toka. Kako bi se proračunalo turbulentno strujanje s RANS jednadžbama, nužna je uspostava modela turbulencije za definiranje Reynolds-ovih naprezanja i članova pronosa skalarnih veličina te zatvaranje sustava jednadžbi osrednjenog strujanja (jednadžbe 5.14 i 5.17a,b,c).

RANS turbulentni modeli su klasificirani na bazi broja dodatnih jednadžbi pronosa, koje je potrebno riješiti zajedno sa RANS jednadžbama (tablica 5.1). Ti modeli formiraju bazu za standardnu proceduru proračuna turbulencije u modernim komercijalnim CFD kodovima. Od navedenih modela “mixing length” and “ $k-\varepsilon$ ” modeli su do sada najšire korišteni i validirani.

Tablica 5.1 Klasifikacija RANS turbulentnih modela na bazi broja dodatnih jednadžbi pronosa, koje je potrebno riješiti zajedno sa RANS jednadžbama

Broj dodatnih jednadžbi pronosa	Ime modela
nula	Model duljine mješanja
dvije	$k-\varepsilon$
sedam	Reynolds stress model

b) Large eddy simulation

Ova forma proračuna turbulencije prati ponašanje najvećih vrtloga. Metoda se zasniva na prostornom filtriranju nestacionarnih Navier–Stokes jednadžbi. Pri tome se “propuštaju” najveći vrtlozi te “odbacuju” odnosno “filtriraju” manji vrtlozi. Utjecaj isfiltriranih manjih vrtloga na razlučenu sliku strujanja (osrednjeno strujanje plus veliki vrtlozi) je obuhvaćen kroz primjenu tzv. “podinkrementalnog modela” (eng: sub-grid scale model).

c) Direct numerical simulation (DNS)

Ove simulacije proračunavaju osrednjeno strujanje i sve turbulentne (fluktuirajuće) komponente brzina. Nestacionarne Navier–Stokes jednadžbe su riješene na specijalnoj proračunskoj mreži koja je zadovoljavajuće gusta za razlučivanje efekata na Kolmogorov-ov skali duljina (na kojoj nastupa energetska disipacija) te sa vremenskim korakom proračuna koji je dovoljno mali da se razluči period najbrže fluktuacije.

Mixing length i $k-\varepsilon$ modeli su bazirani na pretpostavci postojanja analogije između djelovanja viskoznih naprezanja i Reynoldsovih naprezanja na osrednjeno strujanje. Obje vrste naprezanja pojavljuju se na desnoj strani jednadžbi očuvanja količine gibanja, a u **Newton-ovom zakonu viskoznosti** viskozna naprezanja vsu definirana kao proporcionalna rati deformacija elementa tekućine. Za nestišljivu tekućinu navedeno vodi do izraza:

$$\tau_{ij} = \mu s_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (5.19)$$

Ako bi se pojednostavila notacija u zapisu jednadžbi, korištena je tzv. sufiks notacija (konvencija je i ili $j = 1$ odgovara x smjeru, i ili $j = 2$ y smjeru te i ili $j = 3$ z smjeru). Primjerice:

$$\tau_{12} = \tau_{21} = \mu \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (5.20)$$

Turbulentna naprezanja se povećavaju s porastom i rate deformacija. **Boussinesq** je već 1877 predložio da se Reynolds-ova naprezanja izraze kao proporcionalna srednjim ratama deformacije:

$$\tau_{ij} = \rho \overline{u_i' u_j'} = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad ; \quad k = \frac{1}{2} (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}) \quad (5.21a,b)$$

gdje je k oznaka za turbulentnu kinetičku energiju po jedinici mase.

Prvi član s desne strane je analogan jednadžbi 5.19 osim za novi član koji se naziva dinamički koeficijent turbulentne viskoznosti μ_t (eng: eddy viscosity) sa jedinicom koja je istovjetna dinamičkom koeficijentu viskoznosti (Pa s). Učestala je primjena i kinematskog koeficijenta turbulentne viskoznosti (eng: kinematic eddy viscosity) označenog sa $\nu_t = \mu_t / \rho$, s jedinicom koja je istovjetna kinematskom koeficijentu viskoznosti (m^2/s).

Drugi član na desnoj strani osigurava da formula daje korektni rezultat za normalna Reynolds-ova naprezanja ($i = j$):

$$\tau_{xx} = \rho \overline{u'^2} \quad ; \quad \tau_{yy} = \rho \overline{v'^2} \quad ; \quad \tau_{zz} = \rho \overline{w'^2} \quad (5.22a,b,c)$$

U bilo kojem toku suma normalnih naprezanja $-\rho (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2})$ je jednaka minus dvostruka turbulentna kinetička energija po jedinici volumena ($-2 \rho k$) a čime je jedna trećina alocirana na svaku pojedinu komponentu normalnog naprezanja. Time se osigurava da njihova suma uvijek ima fizikalno ispravnu vrijednost.

Turbulentni pronos mase, topline i drugih skalarnih veličina može se modelirati na sličan način obzirom da je pronos turbulencijom za količinu gibanja, masu i toplinu generiran istim mehanizmom – vrtložnim mješanjem (eng: eddy mixing).

Jednadžba 5.21 pokazuje da turbulentni pronos količine gibanja pretpostavlja proporcionalnost gradijentima osrednjenog strujanja. Analogno tome, turbulentni pronos skalarnih veličina je usvojen kao proporcionalan gradientima osrednjenih vrijednosti pronošenih veličina. U sufiks notaciji navedeno se može izraziti na sljedeći način:

$$-\rho \overline{u' \phi'} = \Gamma_t \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \quad (5.23)$$

gdje je Γ_t koeficijent turbulentne difuzije (eng: eddy diffusivity).

5.3. „RANS mixing length“ model turbulencije

Pretpostavlja se da kinematski koeficijent turbulentne viskoznosti ν_t može biti izražen umnoškom mjerila turbulentne brzine \mathcal{D} i turbulentnog mjerila duljina l_t . Dimenziona analiza pokazuje da je jedno mjerilo brzina i jedno mjerilo duljina dostatno za opis efekta turbulencije: $\nu_t = C \mathcal{D} l_t$ gdje je C bezdimenzionalna konstanta proporcionalnosti. Dinamički koeficijent turbulentne viskoznosti je dan sa: $\mu_t = \rho C \mathcal{D} l_t$.

Najveći dio turbulentne kinetičke energije je sadržan u najvećim vrtlozima. Stoga se turbulentno mjerilo duljina l_t smatra karakteristikom tih vrtloga koji imaju intenzivnu interakciju sa osrednjenim strujanjem. Možemo povezati karakteristično mjerilo brzina vrtloga sa karakteristikama osrednjenog strujanja:

$$\mathcal{D} = c l_t \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right| \quad (5.24)$$

gdje je l_t je mjerilo duljina vrtloga a c konstanta.

Apsolutna vrijednost se koristi u svrhu osiguranja pozitivnosti mjerila brzina, neovisno o predznaku gradijenta brzina.

Kombinacijom jednadžbi za \mathcal{D} i ν_t , te zamjenom dviju konstanti C i c s novim mjerilom duljina l_m dobiva se **Prandtlov model miješanja** (eng: Prandtl mixing length model):

$$\mathcal{D} = \ell_m^2 \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right| \quad (5.25)$$

Korištenjem jednadžbe 5.21a te obzirom da je $\partial U / \partial y$ jedini značajan gradijent osrednjenih brzina, turbulentna Reynoldsova napreznaja su opisana sa:

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = -\rho \overline{u'v'} = \rho \ell_m^2 \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right| \frac{\partial U}{\partial y} \quad (5.26)$$

Turbulencija je funkcija strujanja. Ukoliko se ona mijenja nužno je osigurati i varijaciju l_m u modelu miješanja.

Za kategoriju manje složenih turbulentnih tokova (tokovi slobodne turbulencije i graničnog sloja u blizini krute stjenke) struktura turbulencije je dovoljno jednostavna da se l_m može

opisati putem jednostavnih algebarskih izraza (primjeri za dvodimenzionalno strujanje dani u tablici 5.2).

Tablica 5.2 Algebarski izrazi za duljinu mješanja u manje složenim 2D turbulentnim tokovima (D – promjer otvora cijevi na mjestu izlaza mlaza ; y – vertikalna udaljenost od krute stijenke; L - dubine toka u otvorenom kanalu ili promjer cijevi)

Strujanje	Duljina mješanja
Osnosimetričan mlaz	0,075 D
Cijevi i otvoreni kanali	$L (0.14-0.08(1-y/L)^2-0.06(1-y/L)^4)$

5.4. „RANS $k-\varepsilon$ “ model turbulencije

U dvodimenzionalnim tankim slojevima s izraženijim gradijentima u profilu osrednjenih brzina promjene u smjeru strujanja su dovoljno spore da se turbulencija sama prilagođuje lokalnim uvjetima. U slučajevima kada konvekcija i difuzija uzrokuju značajnije razlike između produkcije i destrukcije turbulencije, npr. u strujanju sa recirkulacijom, kompaktna algebarska prezentacija duljine miješanja više nije održiva.

Daljnji korak je razmatranje same turbulencije. $k-\varepsilon$ model se fokusira na mehanizam koji utječe na turbulentnu kinetičku energiju. Trenutna kinetička energija turbulentnog strujanja $k(t) = K + k$ je suma kinetičke energije osrednjenog strujanja $K = \frac{1}{2} (U^2 + V^2 + W^2)$ i turbulentne kinetičke energije $k = (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2})$.

Standardni $k-\varepsilon$ model sadrži dvije jednačbe, jednu za k i jednu za ε , bazirano na relevantnim procesima koji uzrokuju promjene tih varijabli. Koristimo k i ε da definiramo mjerilo brzina \mathcal{G} i mjerilo duljina l_t koja su reprezentativna za turbulenciju makro mjerila (eng: large-scale turbulence):

$$\mathcal{G} = k^{1/2} \quad ; \quad l_t = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \quad (5.27a,b)$$

Dinamički koeficijent turbulentne viskoznosti definiran je na slijedeći način (C_μ je bezdimenzionalna konstanta):

$$\mu_t = C_\rho \mathcal{G} l_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (5.28)$$

Standardni $k-\varepsilon$ model koristi jednačbe pronosa za k i ε kako slijedi:

Rata promjene od k ili ε	+	Ponos od k ili ε sa konvekcijom	=	Ponos od k ili ε sa difuzijom	+	Rata proizvodnje od k ili ε	-	Rata destrukcije od k ili ε
-------------------------------------------	---	-----------------------------------------------------	---	---------------------------------------------------	---	-------------------------------------------------	---	-------------------------------------------------

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \text{div}(\rho k \mathbf{U}) = \text{div} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_k} \text{grad} k \right] + 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \rho \varepsilon \quad (5.29)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \text{div}(\rho \varepsilon \mathbf{U}) = \text{div} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \text{grad} \varepsilon \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (5.30)$$

Jednadžbe sadrže pet konstanti: $C_\mu=0.09$, $\sigma_k=1.0$, $\sigma_\varepsilon=1.3$, $C_{1\varepsilon} = 1.44$ i $C_{2\varepsilon} = 1.92$. U standardnom $k-\varepsilon$ modelu koriste se navedene vrijednosti usvojene iz bogatog eksperimentalnog istraživanja na širokom rasponu turbulentnih tokova.

Proizvodnja (produkcija) i destrukcija turbulentne kinetičke energije je uvijek blisko povezana. Rata disipacije ε je velika na mjestima intenzivne proizvodnje k . Modelska jednadžba za ε pretpostavlja proporcionalnost članova njene proizvodnje i destrukcije sa članovima proizvodnje i destrukcije iz k jednadžbe. Time se osigurava da ε rapidno raste s rapidnim porastom k , te se smanjuje dovoljno brzo za izbjegavanje nastupa fizikalno nesmislenih negativnih vrijednosti turbulentne kinetičke energije pri smanjenu k .

Za proračun Reynoldsovih naprezanja koristi se već spomenuta Boussinesqova relacija izražena jednadžbom 5.21a.

6. Model trodimezionalnog strujanja u otvorenom vodotoku

U ovom poglavlju opisuje se modelski sustav pogodan za analizu trodimenzionalnog strujanja u kontinuiranoj akvatičkoj sredini poput mora, jezera i rijeka. U sklopu modela implementirane su 3D Reynoldsove jednadžbe uz Boussinesqovu pretpostavku o hidrostatskoj raspodjeli tlaka po vertikali stupca analizirane tekućine. U modelu jednadžba kontinuitete definirana je sljedećom jednadžbom:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = S \quad (6.1)$$

gdje je: u, v, w komponente brzina u x, y i z smjeru; S intenzitet ponora ili izvora.

Dvije horizontalne komponente zakona o očuvanju količine gibanja glase:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial vu}{\partial y} + \frac{\partial wu}{\partial z} = fv - g \frac{\partial \eta}{\partial x} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_a}{\partial x} - \frac{g}{\rho_0} \int_z^\eta \frac{\partial \rho}{\partial x} dz + F_u + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_{tv} \frac{\partial u}{\partial z} \right) + u_s S \quad (6.2a)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial v^2}{\partial y} + \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial wv}{\partial z} = -fu - g \frac{\partial \eta}{\partial y} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_a}{\partial y} - \frac{g}{\rho_0} \int_z^\eta \frac{\partial \rho}{\partial y} dz + F_v + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_{tv} \frac{\partial v}{\partial z} \right) + v_s S \quad (6.2b)$$

gdje je: h trenutna dubina tekućine ($=\eta+d$); d srednja normalna dubina; η trenutno nadvišenje razine vodnog lica iznad srednje normalne dubine; f Coriolisov parametar ($2\Omega \sin \phi$; ϕ - geografska latituda); ν_{tv} kinematski koeficijent turbulentne viskoznosti u vertikalnom smjeru; p_a atmosferski tlak; g gravitaciono ubrzanje; ρ gustoća tekućine; ρ_0 referentna gustoća tekućine; x, y prostorne koordinate; t vrijeme; u_s, v_s komponente brzine u x i y smjeru za ponor/izvor.

Članovi horizontalnog naprezanja su opisani putem odnosa gradijent-naprezanje uz pojednostavljenje na slijedeći oblik:

$$F_U = \frac{\partial}{\partial x} \left(2\nu_{tH} \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu_{tH} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) \quad (6.2)$$

$$F_V = \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu_{tH} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(2\nu_{tH} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right) \right) \quad (6.3)$$

gdje je: ν_{tH} kinematski koeficijent turbulentne viskoznosti za horizontalne x i y smjerove.

Rubni uvjeti na površini ($z = \eta$) i dnu ($z = -d$) za komponente brzina u, v, w su:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + u \frac{\partial \eta}{\partial x} + v \frac{\partial \eta}{\partial y} - w = 0, \quad \left(\frac{\partial u}{\partial z}, \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \frac{1}{\rho_0 V_t} (\tau_{sx}, \tau_{sy}) \quad (\text{na } z = \eta) \quad (6.4)$$

$$u \frac{\partial d}{\partial x} + v \frac{\partial d}{\partial y} + w = 0, \quad \left(\frac{\partial u}{\partial z}, \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \frac{1}{\rho_0 V_t} (\tau_{bx}, \tau_{by}) \quad (\text{na } z = -d) \quad (6.5)$$

gdje je: τ_{sx}, τ_{sy} komponente naprezanja na površini (uslijed djelovanja vjetra); τ_{bx}, τ_{by} komponente naprezanja na dnu.

Površinsko naprezanje pri dnu (trenje sa dnom) definirano je jednadžbama 6.6:

$$\tau_{bx} = \rho_0 c_f u_{bx} |u_{bx}| \quad ; \quad \tau_{by} = \rho_0 c_f u_{by} |u_{by}| \quad ; \quad c_f = 1 / \left(\frac{1}{\kappa \ln(\Delta z / z_0)} \right)^2 \quad (6.6a,b,c)$$

gdje je: u_{bx}, u_{by} pridnene brzine u x i y smjeru na vertikalnoj udaljenosti Δz od dna; c_f koeficijent trenja uz pretpostavku važenja logaritamskog profila brzina od dna do Δz ; z_0 karakteristična duljina za hrapavost dna; κ von Karmanova konstanta.

Površinsko naprezanje uzrokovano djelovanjem vjetra opisano je empiričkim jednad. 6.7:

$$\tau_{sx} = \rho_a C_D U_{wx} |U_{wx}| \quad ; \quad \tau_{sy} = \rho_a C_D U_{wy} |U_{wy}| \quad (6.7a,b)$$

gdje je: ρ_a gustoća zraka; C_D koeficijent povlačenja vjetra; U_{wx}, U_{wy} komponente brzine vjetra na 10m od površine.

Ukupna dubina h dobiva se iz kinematskog rubnog uvjeta na površini ukoliko je poznato polje brzina iz jednadžbi očuvanja količine gibanja i kontinuiteta a vertikalnom integracijom lokalne jednadžbe kontinuiteta dobiva se:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial h \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial h \bar{v}}{\partial y} = hS + \hat{P} - \hat{E} \quad (6.8)$$

gdje je: \hat{P} rata oborine; \hat{E} rata evaporacije; \bar{u} i \bar{v} vertikalno osrednjene horizontalne komponente brzina u x i y smjeru.

$$h \bar{u} = \int_{-d}^{\eta} u dz \quad ; \quad h \bar{v} = \int_{-d}^{\eta} v dz. \quad (6.9)$$

Tekućina se pretpostavlja kao nestišljiva zbog čega je gustoća ρ neovisna o tlaku i ovisna o temperaturi T i salinitetu S a što je izraženo sljedećom jednadžbom:

$$\rho = \rho(T, S) \quad (6.10)$$

Pronos unutrašnje energije i mase otopljene tvari definiran je generaliziranom transportnom difuznom jednadžbom:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial u T}{\partial x} + \frac{\partial v T}{\partial y} + \frac{\partial w T}{\partial z} = F_T \frac{\partial}{\partial z} \left(D_v \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \hat{H} + T_S S \quad (6.11)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + u \frac{\partial u S}{\partial x} + \frac{\partial v S}{\partial y} + \frac{\partial w S}{\partial z} = F_S + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_v \frac{\partial S}{\partial z} \right) + S_S S \quad (6.12)$$

$$(F_T, F_S) = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_h \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_h \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] (T, S) \quad (6.13)$$

$$D_h = \frac{\nu_{tH}}{\sigma_T} \quad ; \quad D_v = \frac{\nu_{tV}}{\sigma_T} \quad (6.14)$$

gdje je: D_h , D_v koeficijenti turbulentne difuzije za horizontalni i vertikalni smjer; \hat{H} član intenziteta izvora putem toplinske izmjene sa atmosferom; T_S , S_S temperatura i salinitet u izvoru; F_T , F_S članovi horizontalne turbulentne difuzije za skalarna polja T i S ; σ_T Prantlov broj (=0,9 empirijska konstanta k - ε modela).

Rubni uvjet za temperaturu i salinitet na površini ($z = \eta$) i dnu ($z = -d$) definirani su kako slijedi:

$$D_h \frac{\partial T}{\partial z} = \nu \frac{Q_{UK}}{\rho_0 c_p} + T_p \hat{p} - T_e \hat{E} \quad ; \quad \frac{\partial S}{\partial z} = 0 \quad (\text{za } z = \eta) \quad (6.15)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial S}{\partial z} = 0 \quad (z = -d) \quad (6.16)$$

gdje je: Q_{UK} ukupni površinski tok topline; c_p specifični toplinski kapacitet vode (4217 J/kg 0 K).

Ukoliko se uključi toplinska izmjena sa atmosferom, član evaporacije poprima oblik:

$$\hat{E} = \begin{cases} \frac{q_E}{\rho_0 l_v} & q_E > 0 \\ 0 & q_E \leq 0 \end{cases} \quad (6.17)$$

gdje je: q_E tok latentne topline; l_v latentna toplina prelaska vode u paru.

Jednadžba pronosa (kontinuiteta) za skalarna polja glasi:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial wC}{\partial z} = F_c + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_v \frac{\partial C}{\partial z} \right) - k_p C + C_s S \quad (6.18)$$

$$(F_c) = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_h \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_h \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] (C) \quad (6.19)$$

gdje je: C koncentracija skalarnog polja u pronosu; k_p linearnog rata odumiranja skalarnog polja; C_s koncentracija skalarnog polja u pronosu na poziciji izvora; F_c član horizontalne turbulentne difuzije za promatrano skalarno polje.

Model turbulencije je definiran na bazi koncepta vrtložne viskoznosti uz separaciju vertikalnog i horizontalnih smjerova. U vertikalnom smjeru primjenjuje se k - ε model sa sljedećim obilježjima:

$$v_{tv} = c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (6.20)$$

gdje je: $c_\mu (=0,09)$ empirijska konstanta k - ε modela.

Vrijednosti turbulentne kinetičke energije k i njezine disipacije ε dobivaju se iz pripadnih jednadžbi pronosa:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial uk}{\partial x} + \frac{\partial vk}{\partial y} + \frac{\partial wk}{\partial z} = F_k + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{v_{tv}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial z} \right) + P + B - \varepsilon \quad (6.21)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial u\varepsilon}{\partial x} + \frac{\partial v\varepsilon}{\partial y} + \frac{\partial w\varepsilon}{\partial z} = F_\varepsilon + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{v_{tv}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) + \frac{\varepsilon}{k} (c_{1\varepsilon} P + c_{3\varepsilon} B - c_{2\varepsilon} \varepsilon) \quad (6.22)$$

$$P = \frac{\tau_{xz}}{\rho_0} \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\tau_{yz}}{\rho_0} \frac{\partial v}{\partial z} \approx v_{tv} \left(\left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right) \quad (6.23)$$

$$B = - \frac{v_{tv}}{\sigma_t} N^2 \quad (6.24)$$

$$N^2 = - \frac{g}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial z} \quad (6.25)$$

$$(F_k, F_\varepsilon) = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_h \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_h \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] (k, \varepsilon) ; \quad D_h = \frac{v_{tH}}{\sigma_k} ; \quad D_h = \frac{v_{tH}}{\sigma_\varepsilon} \quad (6.26)$$

gdje je: $\sigma_k (=1)$, $\sigma_\varepsilon (=1,3)$, $c_{1\varepsilon} (=1,44)$, $c_{2\varepsilon} (=1,92)$, $c_{3\varepsilon} (=0)$ empiričke konstante k - ε modela; P produkcija posmičnog naprezanja; B član produkcije uzgonskog djelovanja; N Brunt-Vaeisalae frekvencija; F_k , F_ε članovi horizontalne turbulentne difuzije.

Rubni uvjet za turbulentnu kinetičku energiju k i ratu njezine disipacije ε na slobodnoj površini ($z = \eta$) ovisi o površinskom naprežanju uslijed djelovanja vjetra $U_{\tau s}$:

$$k = \frac{1}{\sqrt{c_\mu}} U_{\tau s}^2 \quad ; \quad \varepsilon = \frac{U_{\tau s}^2}{\kappa \Delta z_s} \quad \text{za} \quad U_{\tau s} > 0 \quad (6.27)$$

$$\frac{\partial k}{\partial z} = 0 \quad ; \quad \varepsilon = \frac{(k \sqrt{c_\mu})^{3/2}}{a \kappa h} \quad \text{za} \quad U_{\tau s} = 0 \quad (6.28)$$

gdje je: $a (=0,07)$ empirička konstanta; Δz_s vertikalna udaljenost od površine na kojoj je primijenjen rubni uvjet.

Rubni uvjet za turbulentnu kinetičku energiju k i ratu njezine disipacije ε na dnu ($z = -d$) definiran je na sljedeći način:

$$k = \frac{1}{\sqrt{c_\mu}} U_{\tau b}^2 \quad ; \quad \varepsilon = \frac{U_{\tau b}^2}{\kappa \Delta z_b} \quad (6.29)$$

gdje je: Δz_b vertikalna udaljenost od dna na kojoj je primijenjen rubni uvjet.

Kinematski koeficijent turbulentne viskoznosti u horizontalnom smjeru ν_{tH} tretiran je Smagorinsky konceptom:

$$\nu_{tH} = c_s^2 l^2 \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (6.30)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (i, j = 1, 2) \quad (6.31)$$

gdje je: c_s Smagorinsky konstanta; l karakteristična duljina; S_{ij} rata deformacije.

7. Model dvodimenzionalnog strujanja u otvorenom vodotoku

U ovom poglavlju opisuje se modelski sustav pogodan za analizu dvodimenzionalnog strujanja u kontinuiranoj akvatičkoj sredini poput mora, jezera i rijeka. Modelom se definiraju procesne jednadžbe za dvodimenzionalno (u horizontalnoj ravnini) stacionarno ili nestacionarno tečenje nestišljive tekućine te konvektivno disperzivni pronos otopljene ili suspendirane tvari u jednom vertikalnom homogenom sloju uz pretpostavku hidrostatske raspodjele tlaka. Sustav jednadžbi sadrži vertikalno integrirane jednadžbe kontinuiteta (7.1) i očuvanja količine gibanja (7.2, 7.3):

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial h\bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial h\bar{v}}{\partial y} = hS \quad (7.1)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial h\bar{u}}{\partial t} + \frac{\partial h\bar{u}^2}{\partial x} + \frac{\partial h\bar{u}\bar{v}}{\partial y} = \\ & = f\bar{v}h - gh \frac{\partial \eta}{\partial x} - \frac{h}{\rho_0} \frac{\partial p_a}{\partial x} - \frac{gh^2}{2\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\tau_{sx}}{\rho_0} - \frac{\tau_{bx}}{\rho_0} + \frac{1}{\rho_0} \left[\frac{\partial}{\partial x} (hT_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y} (hT_{xy}) \right] + hu_s S \end{aligned} \quad (7.2)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial h\bar{v}}{\partial t} + \frac{\partial h\bar{u}\bar{v}}{\partial x} + \frac{\partial h\bar{v}^2}{\partial y} = \\ & = -f\bar{u}h - gh \frac{\partial \eta}{\partial y} - \frac{h}{\rho_0} \frac{\partial p_a}{\partial y} - \frac{gh^2}{2\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial y} + \frac{\tau_{sy}}{\rho_0} - \frac{\tau_{by}}{\rho_0} + \frac{1}{\rho_0} \left[\frac{\partial}{\partial x} (hT_{yx}) + \frac{\partial}{\partial y} (hT_{yy}) \right] + hv_s S \end{aligned} \quad (7.3)$$

gdje je: τ_{sx}, τ_{sy} naprezanja na površini; τ_{bx}, τ_{by} naprezanja na dnu; T_{xx}, T_{xy}, T_{yy} lateralna naprezanja; S intenzitet ponora ili izvora; u_s, v_s komponente brzine u x i y smjeru na mjestu izvora; D_x, D_y koeficijenti disperzije u x i y smjeru.

Površinsko naprezanje pri djelovanju s dnom (trenje sa dnom) definirano je jednadžbom 7.4:

$$\tau_{bx} = \frac{\rho g \bar{u} |\bar{u}|}{C^2} \quad ; \quad \tau_{by} = \frac{\rho g \bar{v} |\bar{v}|}{C^2} \quad (7.4a,b)$$

gdje je: C Chezyjev koeficijent ($C = (1/M) h^{1/6}$; M -Manningov koeficijent hrapavosti);

Površinsko naprezanje uzrokovano djelovanjem vjetra opisano je empiričkim jednadžbama 6.7.

Lateralnim naprezanjima T_{xx}, T_{xy}, T_{yy} u jednadžbama količine gibanja obuhvaćeni su utjecaji turbulentne količine gibanja, usrednjavanja brzina po vertikali i fluktuacija na podinkrementalnom prostornom modelskom mjerilu temeljem formulacije efektivnog kinematskog koeficijenta turbulentne viskoznosti E . Njime se omogućuje prigušenje oscilacija kratkih valova i reprodukcija efekata vezanih na podinkrementalno mjerilo.

$$T_{xx} = E \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \quad ; \quad T_{xy} = \frac{1}{2} E \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) \quad ; \quad T_{yy} = E \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \quad (7.6)$$

$$E = C_{sm}^2 l^2 \left[\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (7.7)$$

gdje je: l udaljenost između dva proračunska čvora modela a C_{sm} modelska konstanta korištene Smagorinski formulacije.

Jednadžba konvektivno-disperzivnog pronosa za salinitet i temperaturu definirane su sljedećim jednadžbama:

$$\frac{\partial}{\partial t}(h\bar{T}) + \frac{\partial}{\partial x}(\bar{u}h\bar{T}) + \frac{\partial}{\partial x}(\bar{v}h\bar{T}) = \frac{\partial}{\partial x}\left(h \cdot D_x \cdot \frac{\partial \bar{T}}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(h \cdot D_y \cdot \frac{\partial \bar{T}}{\partial y}\right) + hH + hT_s S \quad (7.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(h\bar{S}) + \frac{\partial}{\partial x}(\bar{u}h\bar{S}) + \frac{\partial}{\partial x}(\bar{v}h\bar{S}) = \frac{\partial}{\partial x}\left(h \cdot D_x \cdot \frac{\partial \bar{S}}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(h \cdot D_y \cdot \frac{\partial \bar{S}}{\partial y}\right) + hS_s S \quad (7.8)$$

gdje je: \bar{T} i \bar{S} vertikalno osrednjene temperature i salinitet; T_s i S_s temperatura i salinitet izvora.

8. Toplinska izmjena s atmosferom za 2D i 3D model

Toplinska izmjena sa atmosferom računana je na temelju četiri fizikalna procesa: konvektivni pronos topline (direktno vođenje topline), evaporacija (toplina isparavanja), ukupna radijacija dugih valova, ukupna radijacija kratkih valova.

Toplinski tok uslijed konvektivnog vođenja topline, evaporacije i radijacije dugih valova djeluje pretpostavljen je sa djelovanjem na slobodnu površinu. Absorpcijski profil toplinskog toka uslijed kratkovalnog zračenja usvojen je prema Beerovom zakonu prema kojem je smanjenje intenziteta svijetla kroz vodni stupac opisano jednadžbom:

$$I(d) = (1 - \beta)I_0 e^{-\lambda d} \quad (8.1)$$

gdje je: $I(d)$ intenzitet na dubini d ispod površine; I_0 intenzitet neposredno ispod vodene površine; β veličina kojom se uzima u obzir apsorpcija dijela svijetlosne energije (infracrvene) u blizini površine; λ koeficijent svijetlosnog prigušenja. Dio svijetlosne energije absorbirane u blizini površine je βI_0 .

Time je ukupni površinski tok topline definiran izrazom:

$$Q_{UK} = q_E + q_K + \beta q_{KV-UK} + \beta q_{DV-UK} \quad (8.2)$$

Gdje je: Q_{UK} ukupni prijenos topline kroz površinu; q_E toplina isparavanja (latentna toplina); q_K konvektivno vođenje topline; q_{KV-UK} ukupni tok topline kroz radijaciju kratkovalnog sunčevog zračenja; q_{DV-UK} ukupni tok topline kroz radijaciju dugovalnog sunčevog zračenja.

U modelu je član izvora H definiran jednadžbom 8.3 u slučaju trodimenzionalnog i 8.4 u slučaju dvodimenzionalnog modela:

$$H = \frac{q_{KV-UK} (1 - \beta) e^{-\lambda(\eta-z)}}{\rho_0 c_p} \quad (8.3)$$

$$H = \frac{q_E + q_K + \beta q_{KV-UK} + \beta q_{DV-UK}}{\rho_0 c_p} \quad (8.4)$$

Pri tretmanu *evaporacije* Dalton-ov zakon definira odnose za gubitak energije kroz vodenu paru a glasi:

$$q_E = LC_e (a_1 + b_1 W_{2m}) (\rho_{pare\ iznad\ površine} - \rho_{pare\ u\ atm}) \quad (8.5)$$

gdje je: L latentna toplina vodene pare ($2,5 \times 10^6$ J/kg); C_e koeficijent smjese vodene pare ($1,32 \times 10^3$); W_{2m} brzina vjetra 2m iznad površine (m/s); $\rho_{pare\ iznad\ površine}$ gustoća vodene pare u blizini površine vode (kg/m^3); $\rho_{pare\ u\ atm.}$ gustoća vodene pare u atmosferi (kg/m^3); a_1, b_1 koeficijenti.

Mjerenja $\rho_{pare\ iznad\ površine}$ i $\rho_{pare\ u\ atm.}$ ne ostvaruje se direktno, no definirana je relacija između gustoće vodene pare ρ_i i tlaka vodene pare e_i :

$$\rho_i = \frac{0,2167}{T_i} p_i \quad (8.6)$$

U kojoj indeks i označava gustoću vodene pare iznad vodne površine ili u atmosferi. Tlak vodene pare u blizini površine vode $\rho_{pare\ iznad\ površine}$ može se definirati uz pomoć temperature vode a usvajajući pretpostavku da je zrak u blizini površine vode saturiran, te da ima istu temperaturu kao i voda.

$$\rho_{pare\ iznad\ površine} = 6,11 \exp \left\{ K \left(\frac{1}{T_k} - \frac{1}{T_{vode}} \right) \right\} \quad (8.7)$$

gdje je: K konstanta ($5418 \text{ } ^0\text{K}$); T_k temperatura na $0 \text{ } ^0\text{C}$ ($273,15 \text{ } ^0\text{K}$)

Na sličan način tlak vodene pare u atmosferi može se definirati uz pomoć temperature zraka i relativne vlažnosti R :

$$P_{\text{pare u atmosferi}} = R 6,11 \exp \left\{ K \left(\frac{1}{T_k} - \frac{1}{T_{\text{zraka}}} \right) \right\} \quad (8.8)$$

Zamjenom $\rho_{\text{pare iznad površine}}$ i $\rho_{\text{pare u atm.}}$ sa gornjim izrazima dobivamo sljedeću jednakost za toplinu isparavanja:

$$q_E = P_v (a_1 + b_1 W_{2m}) \left(\frac{\exp \left\{ K \left(\frac{1}{T_k} - \frac{1}{T_{\text{vode}}} \right) \right\}}{T_{\text{vode}}} - \frac{R \exp \left\{ K \left(\frac{1}{T_k} - \frac{1}{T_{\text{zraka}}} \right) \right\}}{T_{\text{zraka}}} \right) \quad (8.9)$$

gdje su sve konstante uračunate u latentnu konstantu P_v ($4370 \text{ J}^0\text{K}/\text{m}^3\text{s}$).

Konvekcija (senzibilni toplinski tok) ovisi o tipu graničnog sloja između vodne površine i atmosfere. Generalno govoreći, granični sloj je turbulentan a što daje sljedeću jednakost:

$$q_k = \begin{cases} \rho_{\text{zraka}} C_{\text{zraka}} C_c W_{10m} (T_{\text{vode}} - T_{\text{zraka}}) & \text{za } T_{\text{zraka}} > T_{\text{vode}} \\ \rho_{\text{zraka}} C_{\text{vode}} C_c W_{10m} (T_{\text{vode}} - T_{\text{zraka}}) & \text{za } T_{\text{zraka}} \leq T_{\text{vode}} \end{cases} \quad (8.10)$$

gdje je: ρ_{zraka} gustoća zraka (kg/m^3); C_{zraka} specifična toplina zraka ($1007 \text{ J}/\text{kg}^0\text{K}$); C_{vode} specifična toplina vode ($4186 \text{ J}/\text{kg}^0\text{K}$); W_{10m} brzina vjetra 10m iznad površine (m/s); T_{vode} apsolutna temperatura vode (^0K); T_{zraka} apsolutna temperatura zraka (^0K); C_c koeficijent konvekcije ($1,41 \times 10^{-3}$).

Radijacija kratkih valova od sunca sadržana je u obliku elektromagnetskih valova duljine između 1000 i 30000 Å. Većina se absorbira u ozonskom omotaču kroz koji do zemljine površine prolazi samo dio cjelokupne valne energije. Budući da je većina infracrvenih i ultraljubičastih zraka absorbirana solarna radijacija na zemlju sadržana je od svjetlosti valnih duljina između 4000 i 9000 Å. Takvu radijaciju uobičajeno se naziva radijacija kratkih valova a njezin intenzitet ovisi o udaljenosti od sunca, upadnom kutu, latitudi, kozmičkom zračenju te oblačnosti i količini vodene pare u atmosferi.

Odnos između srednje udaljenosti, r_0 do sunca i trenutne udaljenosti r dan je kao:

$$E_0 = \left(\frac{r_0}{r} \right)^2 = 1,000110 + 1,134221 \cos(\Gamma) + 0,001280 \sin(\Gamma) + 0,000719 \cos(2\Gamma) + 0,000077 \sin(2\Gamma) \quad (8.11)$$

$$\Gamma = \frac{2\pi(d_n - 1)}{365} \quad (8.12)$$

gdje je: d_n dan u kalendarskoj godini.

Dnevna rotacija zemlje oko polarnih osi doprinosi promjeni solarne radijacije. Sezonska radijacija definirana je putem solarnog upadnog kuta kao:

$$\begin{aligned} \delta = & 0,006918 - 0,399912 \cos(\Gamma) + 0,07257 \sin(\Gamma) \\ & - 0,006758 \cos(2\Gamma) + 0,000907 \sin(2\Gamma) \\ & - 0,002697 \cos(3\Gamma) + 0,00148 \sin(3\Gamma) \end{aligned} \quad (8.13)$$

Duljina dana N_d varira sa δ . Za danu latitudu ϕ (pozitivnu na sjevernoj hemisferi) duljina dana je izračunava se na sljedeći način:

$$N_d = \frac{24}{\pi} \arccos\{-\tan(\phi)\tan(\delta)\} \quad (8.14)$$

Kut izlaza sunca, ω_{sr} je:

$$\omega_{sr} = \arccos\{-\tan(\phi)\tan(\delta)\} \quad (8.15)$$

Intenzitet radijacije kratkih valova na površinu paralelnu sa površinom zemlje mijenja se sa upadnim kutem. Najveći intenzitet je u zenitu a najniži za vrijeme zalaska i izlaska sunca. Integracijom preko cijelog dana intenzitet kozmičkog zračenja u radijaciji kratkih valova na površinu dobiva se kao:

$$H_0 = \frac{24}{\pi} q_{sc} E_0 \cos(\phi) \cos(\delta) (\sin(\omega_{sr}) - \omega_{sr} \cos(\omega_{sr})) \quad (8.16)$$

gdje je: q_{sc} solarna konstanta.

Dnevna radijacija uz oblačno nebo H definirana je sa sljedećim izrazom (Angstromov zakon):

$$\frac{H}{H_0} = a_2 + b_2 \frac{n}{N_d} \quad ; \quad a_2 = 0,1 + 0,24 \frac{\bar{n}}{N_d} \quad ; \quad b_2 = 0,38 + 0,08 \frac{\overline{N_d}}{n} \quad (8.17)$$

gdje je: n broj sunčanih sati. Crtica označava mjesečno osrednjene vrijednosti. Koeficijenti a_2 i b_2 su konstante Angstromovog zakona.

Prema tome, prosječna satna radijacija kratkovalnog zračenja q_{KV} može se pisati na sljedeći način:

$$q_{KV} = \left(\frac{H}{H_0} \right) q_0 (a_3 + b_3 \cos(\omega_i)) \quad (8.18)$$

gdje je:

$$a_3 = 0,4090 + 0,5016 \sin\left(\omega_{sr} - \frac{\pi}{3}\right) ; \quad b_3 = 0,6609 - 0,4767 \sin\left(\omega_{sr} - \frac{\pi}{3}\right) \quad (8.19)$$

Intenzitet kozmičkog zračenja q_0 i satni kut ω_i su dani kao:

$$q_0 = q_{sc} E_0 \left(\sin(\phi) \sin(\delta) + \frac{24}{\pi} \sin\left(\frac{24}{\pi}\right) \cos(\phi) \cos(\delta) \cos(\omega_i) \right) \quad (8.20)$$

$$\omega_i = \frac{\pi}{12} (12 + \text{korekcija za ljetno vrijeme} - \frac{E_t}{60} \frac{4}{60} (L_s - L_e) - \text{lokalno vrijeme}) \quad (8.21)$$

Vremenski meridijan L_s je standardna longituda za vremensku zonu a L_e je lokalna latituda. E_t se naziva jednadžba vremena i varijabilna je tijekom godine i definira se na sljedeći način:

$$E_t = (0,000075 + 0,001868(\Gamma) - 0,032077 \sin(\Gamma) - 0,014615 \cos(2\Gamma) - 0,04089 \sin(2\Gamma)) \cdot 229,18 \quad (8.22)$$

Solarna radijacija koja djeluje na vodenu površinu ne penetrira u potpunosti već se jedan njezin dio reflektira odnosno gubi osim ukoliko ne dolazi do ponovnog reflektiranja od atmosfere ili okolne topografije. Takva refleksija solarne energije naziva se *albedo*. Količina energije koja se gubi kroz albedo ovisi o kutu upada i kutu refrakcije a za glatke vodne površine refleksija se može izraziti kao:

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(\frac{\sin^2(i-r)}{\sin^2(i+r)} + \frac{\tan^2(i-r)}{\tan^2(i+r)} \right) \quad (8.23)$$

gdje je: i upadni kut ; r kut refrakcije ; α koeficijent refleksije (5-40%)

Prema tome ukupna radijacija kratkih valova prikazuje se kao:

$$q_{KV-UK} = (1 - \alpha) q_{KV} \frac{10^6}{3600} \quad (8.24)$$

Tijelo ili površine emitiraju elektromagnetsku energiju u svim valnim duljinama spektra. *Radijacija dugih valova* sadrži valne duljine između 9000 i 25000 Å. Radijacija u tom intervalu je infracrvena i emitirana je od atmosfere i vodene površine. Emisija od vodene površine prema atmosferi minus radijacija od atmosfere prema vodenoj površini daje ukupnu radijaciju dugih valova koja je ovisna o stupnju naoblake, temperaturi zraka, tlaku vodene pare u atmosferi, relativnoj vlazi.

U modelu izlazna radijacija dugih valova je dana u sljedećem obliku:

$$q_{DV-UK} = \sigma_{sb} T_{zraka}^4 \left(a - b \sqrt{10 \cdot p_d} \right) \left(c + d \frac{n}{N_d} \right) \quad (8.25)$$

gdje je: a , b , c , d konstante dane sa vrijednostima (0,56 ; 0,077 mb^{-1/2} ; 0,1 ; 0,9); p_d tlak vodene pare na temperaturi ukapljavanja mjeren u mb; n broj sunčanih sati ; N_d broj mogućih sunčanih sati; σ_{sb} Stefan-Boltzmann-ova konstanta (5,6697x10⁻⁸ W/m²K⁴); T_{zraka} temperatura zraka.

B

MODELIRANJE STRUJANJA I PRONOSA U
STIJENI MEĐUZRNSKE POROZNOSTI

1. Uvod

Za uspješnu eksploataciju podzemnih voda potrebno je poznavati tokove podzemnih voda i mehanizam pronosa u njima, uključujući reakcije tekućina i otopljenih tvari. Jedan od alata pomoću kojih se to može riješiti je uspostava modela kojim se simuliraju tokovi podzemnih voda te se analizira pronos otopljene ili suspendirane tvari. Numerički modeli razvijaju se od sredine 1960-ih. Razvoj modela za simuliranje toka podzemnih voda pomoću numeričkih modela odvija se usporedno sa razvojem i poboljšanjem performansi i mogućnosti računala.

U ovom poglavlju obrađuju se osnove modeliranja strujanja i pronosa kroz stijenu međuzrnske poroznosti sa naglaskom na nereaktivne otopljene tvari (bez fenomenologije pronosa višefaznih tekućina) temeljem determinističkog pristupa.

Procesi toka podzemnih voda se uglavnom opisuju jednadžbama procesa opisanim Darcyevim zakonom i zakonom održanja mase (jednadžba kontinuiteta). Međutim Darcyev zakon ima ograničenja koja se moraju uzeti u obzir kod modeliranja.

Cilj modela kojim se simulira pronos tvari podzemnim vodama je da se u konačnici može dobiti informacija o koncentraciji otopljenih tvari u sustavu podzemnih voda na bilo kojem mjestu u bilo kojem vremenskom trenutku. Teoretske postavke jednadžbama kojima se opisuje pronos tvari vrlo su dobro opisane u literaturi. Promjene koncentracije u dinamičnim sustavima strujanja podzemnih voda očituju se kroz četiri procesa: *konvekcija*, (u kojoj se otopljena tvar pronosi samim strujanjem podzemne vode), *molekularna difuzija*, (u kojoj se otopljena tvar pronosi zbog razlike u koncentraciji otopljene tvari u mediju), *hidrodinamička disperzija* (kao mehanički proces širenja u mediju) i *reakcije* (određena otopljena tvar može se povećati ili smanjiti uslijed djelovanja kemijskih, bioloških i fizikalnih reakcija vode i u njoj otopljenih tvari).

Realnu okolinu u kojoj se odvija strujanje podzemnih voda sačinjava kompleksna, trodimenzionalna, heterogena hidrogeološka sredina. Takva varijabilnost uvelike utječe na tok podzemne vode, kao i na pronos tvari. Takva sredina se može točnije opisati samo kroz pažljiva hidrogeološka terenska ispitivanja. Bez obzira na količinu podataka kojom se raspolaže, uvijek postoji određena vjerojatnost uvođenja greške u opisu rubnih uvjeta i ostalih obilježja podzemnih sustava. Stohastički pristup u prikazu i opisu potpovršinskih stijenskih sustava pokazao je prednost u opisivanju njegovih heterogenih karakteristika.

2. Osnovni zakoni i jednadžbe procesa

Matematička formulacija je bazirana na osnovnim principima i na empirijskim zakonima.

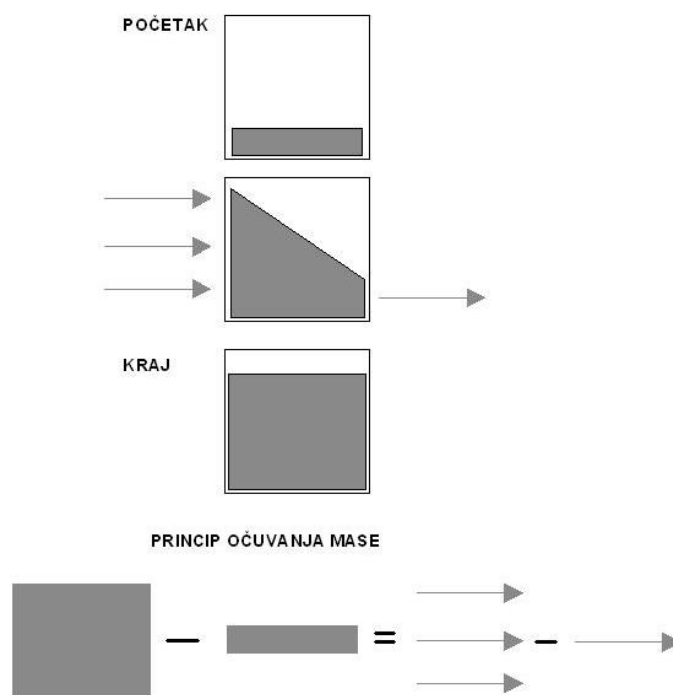
Najvažniji su zakoni očuvanja:

- zakon očuvanja mase
- zakon očuvanja količine gibanja
- zakon očuvanja energije

2.1. *Zakon očuvanja mase*

Budući da se masa ne stvara niti uništava mora vrijediti: masa u kontrolnom volumenu u trenutku $t+\Delta t$ jednaka je zbroju mase u kontrolnom volumenu u trenutku t i mase koja je tijekom vremena Δt ušla u kontrolni volumen minus masa koja je tijekom vremena Δt izašla iz kontrolnog volumena preko rubova kontrolnog volumena Δx , Δy i Δz . Prema tome, promjena mase u kontrolnom volumenu tijekom odabranog vremenskog perioda jednaka je razlici unešene mase u kontrolni volumen i iznešene mase iz kontrolnog volumena tijekom odabranog vremenskog perioda.

Na slici 2.1 prikazana je promjena mase u kontrolnom volumenu za jednodimezionalnu situaciju. Prvo polje sadrži količinu mase na početku vremenskog perioda, a treće polje količinu mase na kraju vremenskog perioda. Tijekom vremenskog perioda „jači“ tok mase ulazi preko lijevog ruba, a izlazni „slabiji“ tok mase preko desnog ruba.



Slika 2.1 Grafičko objašnjenje jednadžbe očuvanja mase

Masa na početku i na kraju perioda t i $t+\Delta t$ dobiva se izrazom:

$$\theta \cdot c(x,t) \cdot \Delta x \Delta y \Delta z \quad \text{i} \quad \theta \cdot c(x,t+\Delta t) \cdot \Delta x \Delta y \Delta z$$

gdje je θ volumni postotak analizirane faze u kontrolnom volumenu (poroznost ukoliko se promatra tekuća faza u saturiranom vodonosniku); Δx , Δy , Δz rubovi kontrolnog volumena; c koncentracija izražena kao odnos masa promatrane tvari/volumen.

Promjena mase u kontrolnom volumenu u vremenu Δt izražena je s:

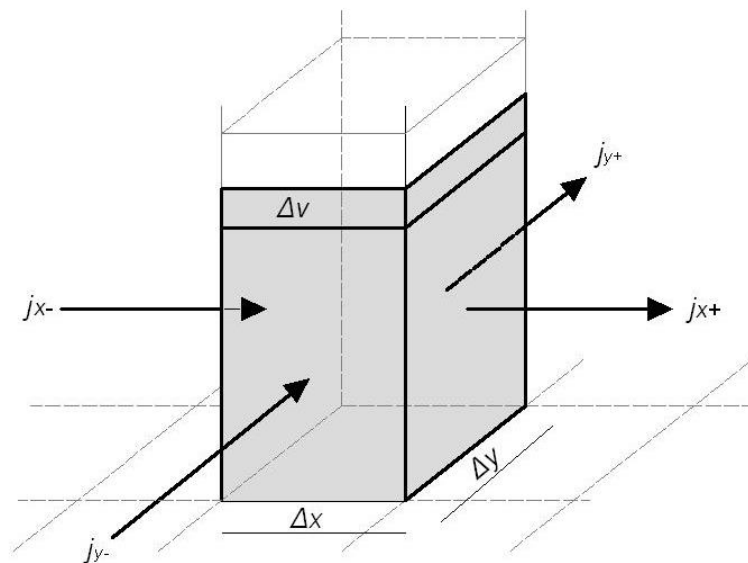
$$\theta \cdot \frac{c(x,t+\Delta t) - c(x,t)}{\Delta t} \cdot \Delta x \Delta y \Delta z$$

Protoci u x -smjeru dani su preko rubova kontrolnog volumena izrazom:

$$\theta j_{x-}(x,t) \Delta y \Delta z \quad \text{i} \quad \theta j_{x+}(x,t) \Delta y \Delta z$$

gdje je: j_{x-} protok mase kroz površinu lijevog ruba kontrolnog volumena u „negativnom“ smjeru $-x$; j_{x+} protok mase kroz površinu desnog ruba kontrolnog volumena u „pozitivnom“ smjeru $+x$.

U općem slučaju protoci mogu biti promjenjivi u vremenu i prostoru. Protoci su pozitivni ako unose masu u kontrolni volumen i negativni ako iznose masu iz kontrolnog volumena. Fizikalna jedinica za protok mase je $[M/(L^2 \cdot T)]$. Umnožak $\theta \Delta y \Delta z$ označeva proticajnu površinu.



Slika 2.2 Kontrolni volumen za primjer dvodimenzionalnog toka

Bilanca protoka izražena je razlikom protoka na ulazu (lijeva strana) i izlazu (desna strana):

$$\theta (j_{x-}(x,t) - j_{x+}(x,t)) \Delta y \Delta z$$

U jednodimenzionalnom slučaju protoci kroz ostala četiri ruba kontrolnog volumena se zanemaruju. Promjena mase u kontrolnom volumenu u vremenu Δt dobiva se iz sljedeće jednakost:

$$\theta \frac{c(x,t+\Delta t) - c(x,t)}{\Delta t} \Delta x \Delta y \Delta z = \theta (j_{x-}(x,t) - j_{x+}(x,t)) \Delta x \Delta z \quad (2.1)$$

Dijeljenjem s $\Delta x \Delta y \Delta z$ i θ dobiva se izraz:

$$\frac{c(x,t+\Delta t) - c(x,t)}{\Delta t} = - \frac{j_{x+}(x,t) - j_{x-}(x,t)}{\Delta x} \quad (2.2)$$

Odgovarajuća diferencijalna jednadžba dobiva se prelaskom prostornog i vremenskog inkrementa u obliku konačnih diferencija Δx i Δt na infinitezimale:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} j_x \quad (2.3)$$

Dobivena je diferencijalna jednadžba očuvanja mase i vrijedi za jednodimenzionalno strujanje uz pretpostavku odsustva izvora ili ponora. Mjesta unutar kontrolnog volumena na kojima tekućina ulazi nazivaju se izvori, a mjesta na kojima tekućina izlazi iz kontrolnog volumena ponori. Prikazani diferencijalni oblik jednadžbe očuvanja mase služi kao podloga za razvoj matematičkih modela.

Ukoliko su prisutan izvor ili ponor potrebno je definirati i njegovu izdašnost $q(x,t)$ s jedinicom $[M/(L^3 \cdot T)]$. Izdašnost izvora q je volumen tekućine koji u jedinici vremena uđe u kontrolni volumen. Kako se u općem slučaju izdašnost može mijenjati u prostoru i vremenu, u jednadžbu očuvanja potrebno je dodati odgovarajući integral:

$$\iint_{\Delta x \Delta t} q(x,t) dt dx$$

Iznos je pozitivan ako se masa dodaje (izvor) i negativan ako se masa ekstrahira (ponor). Dodavanjem člana izvor/ponor u izraz (2.3) dolazi se sljedeća jednakost:

$$\theta \frac{\partial c}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \theta j_x + q \quad (2.4)$$

Za trodimenzionalni slučaj potrebno je uzeti u obzir i doprinose komponente protoka u y i z smjeru: j_y , j_z i j_z a čime se dobiva jednakost:

$$\theta \frac{\partial c}{\partial t} = - \left(\frac{\partial}{\partial x} \theta j_x + \frac{\partial}{\partial y} \theta j_y + \frac{\partial}{\partial z} \theta j_z \right) + q \quad (2.5)$$

Jednadžba 2.5 je opća jednadžba kontinuiteta (očuvanja mase) za trodimenzionalni slučaj. Primjenom operatora ∇ (nabla):

$$\nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \text{ u 3D, } = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} \text{ u 2D, } = \frac{\partial}{\partial x} \text{ u 1D} \quad (2.6)$$

Jednadžba 2.5 može se izraziti u skraćenom obliku:

$$\theta \frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot \theta \mathbf{j} + q \quad (2.7)$$

Na desnoj strani ∇ operator se množi sa vektorom protoka $\theta \mathbf{j} = \theta \begin{pmatrix} j_x \\ j_y \\ j_z \end{pmatrix}$ u vidu vektorskog

produkta. Broj komponenti u vektoru protoka i u ∇ operatoru jednak je broju prostornih dimenzija. U dvodimenzionalnom prostoru, kako je prikazano na slici 2, vektor protoka ima dvije komponente. Kako je gustoća nestišljive tekućine konstantna, promjena mase tekućine u kontrolnom volumenu rezultira promjenom volumena ΔV .

Protok mase može se izraziti produktom koncentracije i brzine. U trodimenzionalnom strujnom polju postoje tri komponente vektora brzine a što rezultira sa tri komponente protoka mase:

$$J_x = v_x c \quad j_y = v_y c \quad j_z = v_z c \quad (2.8)$$

Koristeći vektorsku notaciju dobiva se:

$$\mathbf{j} = c \mathbf{v} \quad (2.9)$$

Na desnoj strani (2.9) nalazi se skalarni produkt skalara koncentracije c i vektora brzine \mathbf{v} .

2.2. Komponente pronosa

Pronos je općenit naziv za procese u kojima se utvrđuje raspodjela biokemijskih elemenata ili topline u prirodnom okolišu. U ovom poglavlju pronos se shvaća u užem smislu kao međudjelovanje fizikalnih procesa i njihovo djelovanje na pojedine komponente ili na toplinu. Drugi procesi kao što su sorpcija, razgradnja, raspadanje i različite vrste reakcija, nisu koncipirani kao procesi pronosa te su detaljnije objašnjeni u nastavku.

Procesi pronosa važan su dio svih prirodnih sustava. Termin pronosa nije striktno vezan za određeni dio prirodnih procesa. Pronos topline ili mase učestali su fenomeni koji se mogu naći u hidrosferi, atmosferi, u površinskim vodama, jezerima i oceanima, u sedimentima, u podzemnoj vodi, u tlu, te u višefaznim kao i u jednofaznim sustavima.

Postoje dvije vrste komponente procesa pronosa u užem smislu: *konvekcija i difuzija/disperzija*. Konvekcija označava prijenos u najužem smislu: čestica se pomaknula sa jednog mjesta na drugo sa strujnim poljem. Konvekcija je pronos tvari uzrokovan postojanjem polja strujanja a pomak čestice promatrane tvari je po iznosu jednak umnošku brzine i vremena. Difuzija i disperzija su procesi koji su vezani uz razlike koncentracija tvari u promatranom prostoru. U svim sustavima postoji tendencija za izjednačavanjem koncentracije na način da se inducira pronos s mjesta većih koncentracija prema mjestu manjih koncentracija. Pri tome se jednačba pronosa dobiva temeljem primjene jednačbe kontinuiteta na promatranom elementarnom volumenu.

Uzimajući u obzir pronos topline nastaje diferencijalna jednačba sa temperaturom T kao zavisnom varijablom. Jednačba se izvodi iz zakona očuvanja energije i Fourierovog zakona. S matematičkog stajališta to je jednaka diferencijalna jednačba jednačbi pronosa tvari, samo sa drugim značenjima koeficijenata.

Osnova zakona očuvanja je izražena općenitom jednačbom kontinuiteta. Slijedeći korak je generalizacija jednačbe očuvanja mase. Očuvanje varijable B , koja može predstavljati masu, količinu gibanja ili energiju i koja je ovisna o vremenu t i tri prostorne dimenzije x , y i z , izražava se diferencijalnom jednačbom:

$$\frac{\partial}{\partial t} B = \frac{\partial}{\partial x} j_{BX} + \frac{\partial}{\partial y} j_{BY} + \frac{\partial}{\partial z} j_{BZ} + Q \quad (2.10)$$

gdje varijable j_{BX} , j_{BY} i j_{BZ} predstavljaju protoke u trodimenzionalnom prostoru. Protoci, kao i drugi izrazi u jednačbi kontinuiteta, ovise o nezavisnim varijablama prostora x, y, z i o vremenu t . Varijabla Q predstavlja izdašnosti izvora i ponora. Ako je iznos $Q(x, y, z, t)$ pozitivan, radi se o *izvoru* u vremenu t i na koordinatama $r=(x, y, z)$, a ako je iznos $Q(x, y, z, t)$ negativan radi se o *ponoru*.

Jednadžba kontinuiteta govori da je promjena mase u kontrolnom volumenu u jedinici vremena jednaka razlici protoka mase koji je ušao i izašao iz kontrolnog volumena u jedinici vremena. Jednadžba kontinuiteta je dobivena na infinitezimalno malom kontrolnom volumenu sa rubovima Δx , Δy i Δz (u 3D).

U infinitezimalno malom ali konačnom vremenskom intervalu Δt , količina varijable B po jedinici volumena mijenja se iz $B(x,y,z,t)$ u $B(x,y,z,t+\Delta t)$. Prema tome, ukupna promjena količine B u kontrolnom volumenu $\Delta x\Delta y\Delta z$, u vremenskom periodu Δt , iznosi $(B(x,y,z,t+\Delta t)-B(x,y,z,t))\Delta x\Delta y\Delta z$. S druge strane, ukupna promjena količine B u kontrolnom volumenu $\Delta x\Delta y\Delta z$, u vremenskom periodu Δt , može se izraziti i temeljem protoka/ponora/izvora. U svakoj prostornoj dimenziji nalaze se po dvije površine, preko kojih se ovisno o odgovarajućoj komponenti protoka ostvaruju ulazi ili izlazi mase, količine gibanja ili energije. U x -smjeru razlika protoka kroz dva ruba je $j_{Bx}(x+\Delta x/2,y,z,t) - j_{Bx}(x-\Delta x/2,y,z,t)$ a množenjem s pripadnom površinom kontrolnog volumena $\Delta y\Delta z$ i vremenom Δt dobiva se x komponenta promjene količine B u kontrolnom volumenu $\Delta x\Delta y\Delta z$ kroz period Δt . Pri tome je usvojena i pretpostavka da je vremenski period Δt mali, pa se promjene protoka/izvora/ponora u tom vremenskom periodu mogu zanemariti.

Ukupne promjene varijable B u kontrolnom volumenu $\Delta x\Delta y\Delta z$, u vremenskom periodu Δt moraju biti jednake što rezultira sljedećim izrazom:

$$\begin{aligned} (B(x,y,z,t+\Delta t) - B(x,y,z,t)) \Delta x\Delta y\Delta z = & (j_{Bx}(x+\Delta x/2,y,z,t) - j_{Bx}(x-\Delta x/2,y,z,t))\Delta y\Delta z\Delta t \\ & + (j_{By}(x,y+\Delta y/2,z,t) - j_{By}(x,y-\Delta y/2,z,t))\Delta x\Delta z\Delta t \\ & + (j_{Bz}(x,y,z+\Delta z/2,t) - j_{Bz}(x,y,z-\Delta z/2,t))\Delta x\Delta y\Delta t + Q \Delta x\Delta y\Delta z\Delta t \end{aligned} \quad (2.11)$$

Odgovarajuća jednadžba za 2D slučaj i odsustvo izvora/ponora je:

$$\Delta V = (j_{x+} - j_{x-})\Delta y\Delta t + (j_{y+} - j_{y-})\Delta x\Delta t.$$

Jednadžba 2.11 može se pojednostaviti dijeljenjem s $\Delta x \Delta y \Delta z \Delta t$ a čime se dobiva jednadžba 2.12:

$$\begin{aligned} \frac{B(x,y,z,t+\Delta t) - B(x,y,z,t)}{\Delta t} = & \frac{j_{Bx}(x+\Delta x/2,y,z,t) - j_{Bx}(x-\Delta x/2,y,z,t)}{\Delta x} \\ & + \frac{j_{By}(x,y+\Delta y/2,z,t) - j_{By}(x,y-\Delta y/2,z,t)}{\Delta y} \\ & + \frac{j_{Bz}(x,y,z+\Delta z/2,t) - j_{Bz}(x,y,z-\Delta z/2,t)}{\Delta z} + Q \end{aligned} \quad (2.12)$$

Prelaskom s konačnih razlika u infinitezimalne veličine $\Delta x \rightarrow dx$, $\Delta y \rightarrow dy$, $\Delta z \rightarrow dz$, $\Delta t \rightarrow dt$ i prema diferencijalnoj jednadžbi 2.10 dobiva se sljedeća vektorska jednadžba:

$$\frac{\partial B}{\partial t} = \nabla \cdot \mathbf{j}_B + Q \quad (2.13)$$

Jednadžbom 2.13 opisana je komponenta konvektivnog pronosa dok se difuzijska i disperzivna komponenta pronosa tretiraju u nastavku (Fickov zakon).

2.3. Generalizacija Fickovog zakona

2.3.1. Difuzija

Difuzija je pronos uzrokovan posljedicama razlike u koncentraciji promatrane tvari u otopini na molekularnoj razini. Kada u sustavu postoji područje veće koncentracije i područje manje koncentracije, nastaje difuzijski protok neke komponente s mjesta veće koncentracije prema mjestu manje koncentracije. Na molekularnoj razini, difuzija je proces nasumičnog kretanja molekula u svim smjerovima. U sustavima bez razlika u koncentracijama, zajedničkim nasumičnim kretanjem molekula zadržava se jednaka razina koncentracije u svim točkama tog sustava.

Sustav koji ima početnu razliku u koncentracijama, difuzijom će nakon određenog vremenskog perioda postići konstantnu koncentraciju u svim točkama, ako nijedan drugi proces (poput konvekcije – strujanja) nije prisutan. Drugi procesi mogu stabilizirati koncentracijski gradijent pri čemu se difuzivni pronos uravnotežava procesima koji održavaju konstantan ulazni i izlazni tok.

Pronos promatrane tvari unutar neke otopine uzrokovan difuzijom može se opisati prvim Fick-ovim zakonom izraženom za fazu tekućine:

$$\mathbf{j} = -D \nabla c \quad (2.14)$$

gdje je: D koeficijent molekularne difuzije ili difuzivnost s jedinicom [površina/vrijeme] ovisan o karakteristikama tekućine u kojoj se difuzija odvija, tvari koja se unosi u tekućinu, temperaturi, tlaku a ponekad i o samoj koncentraciji. Proizlazi da je difuzijski pronos proporcionalan negativnom koncentracijskom gradijentu. Negativan predznak koeficijenta D znači da proces difuzije teče iz područja veće prema području manje koncentracije tvari.

Izraz 2.14, vrijedi za tekućine i plinove a u slučaju trodimenzionalnog problema vrijedi:

$$\nabla c = \begin{pmatrix} \partial c / \partial x \\ \partial c / \partial y \\ \partial c / \partial z \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

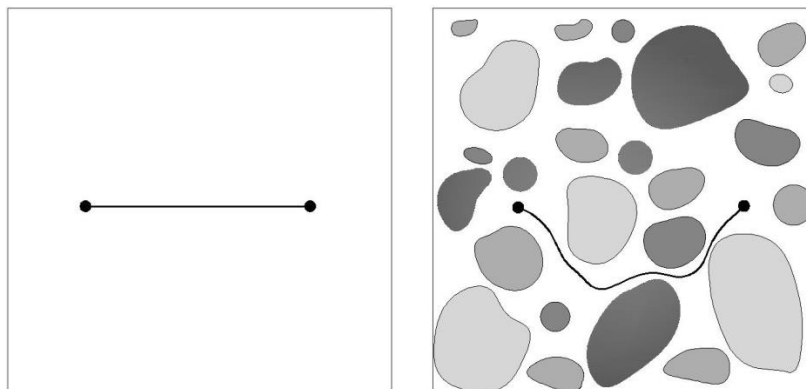
Molekularna difuzija je dominantan proces u slučajevima kad su brzine toka podzemne vode vrlo male ili odsutne, odnosno kad nema konvekcije (npr. kod pronosa zagađivala kroz brtvene slojeve na sanitarnim deponijama). Uobičajeno je označavanje koeficijenta molekularne difuzije s oznakom D_{mol} dok oznake D za poopćeni slučaj difuzije.

U stijenama međuzrnske poroznosti pronos tvari uzrokovan molekularnom difuzijom je sporiji nego u samoj otopini. To je posljedica proticajne površine sačinjene od tekuće i krute faze, pri čemu se pronos odvija samo kroz zakrivljene strujne cijevi s povećanom duljinom puta.

Kako bi se izrazio Fickov zakon za višefazne sustave, kao npr. u poroznim sredinama, moraju se napraviti dvije izmjene. U prvoj izmjeni mora se uzeti u obzir da je površina kroz koju se ostvaruje difuzijski pronos tvari samo dio ukupne površine kroz koju se ostvaruje pronos. Općenito se usvaja smanjenje protjecajne površine s koeficijentom poroznosti koji se najčešće definira kao odnos volumena šupljina u uzorku tla prema ukupnom volumenu uzorka. Poroznost θ kod procesa pronosa definira se kao onaj dio šupljina/pora kroz koji se odvija tok podzemne vode pa je uobičajeno i uvođenje pojma efektivne poroznosti θ_{ef} .

U drugoj izmjeni uzimaju se u obzir dužine puta pronosa tvari uzrokovanog difuzijom, koji je u višefaznim sustavima dulji nego u homogenim jednofaznim sustavima. Na slici 2.3 prikazan je slučaj jednofaznog sustava u kojem je put pronosa kraći nego u višefaznom, budući da ne postoje „prepreke“ kroz koje je onemogućeno protjecanje tekućine. Produljenje puta u pronosu opisuje se faktorom produljenja \mathfrak{F} :

$$j = -\frac{1}{\mathfrak{F}^2} D_{mol} \nabla c \quad (2.16)$$



Slika 2.3 Usporedba dužina puta pronosa u jednofaznim i višefaznim sistemima

Neki autori koristi termin faktor *krivudavosti* τ (eng. *tortuosity*) umjesto faktora \mathcal{G} s međusobnom vezom faktora $\tau = 1/\mathcal{G}^2$. Time izraz 21.16 prelazi u sljedeći oblik:

$$\mathbf{j} = -\tau D_{mol} \nabla c \quad (2.17)$$

Time je definirana i *efektivna difuzivnost* :

$$D_{ef} = \theta \tau D_{mol} \quad (2.18)$$

Zaključno koeficijent efektivna difuzije D_{ef} (efektivna difuzivnost) koristi se u slučaju višefaznog sustava, dok je koeficijent molekularne difuzije D_{mol} (molekularna difuzivnost) vezan uz jednofazni sustav. protjecanje. jednofazna difuzivnost se često naziva i *molekularna difuzivnost* koja se označava sa D_{mol} .

2.3.2. Disperzija

Ako je u sustavu prisutna konvekcija (pronos osnovnim tokom), potrebna je drugačija generalizacija Fickovog zakona izražena jednadžbom 2.14. Razmatra se tekućina koja protječe kroz homogenu poroznu sredinu, difuzivnost je proporcionalna gradijentu koncentracija i nije konstanta nego ovisi o brzini toka (strujanja). Takav proces se naziva *disperzija*. Disperzija je posljedica fluktuacije brzina strujanja u odnosu na prosječnu brzinu kod realnog profila brzina u pojedinoj strujnoj cijevi te lokalnih nehomogenosti strukture pora (mehanička disperzija). Intenzitet disperzije bitno ovisi i o dimenzijama prostora u kojem se pronos ostvaruje. Za 1D slučaj dobiva se:

$$D = \tau D_{mol} + \alpha_L v \quad (2.20)$$

Efektivna disperzivnost, koja se koristi u Fickovom zakonu, sastoji se od dva dijela. Jedan dio dobiva se iz molekularne difuzije, a drugi iz toka kroz poroznu sredinu. Faktor proporcionalnosti između disperzije i srednje brzine toka v dan je koeficijentom longitudinalne disperzivnosti α_L s jedinicom duljine.

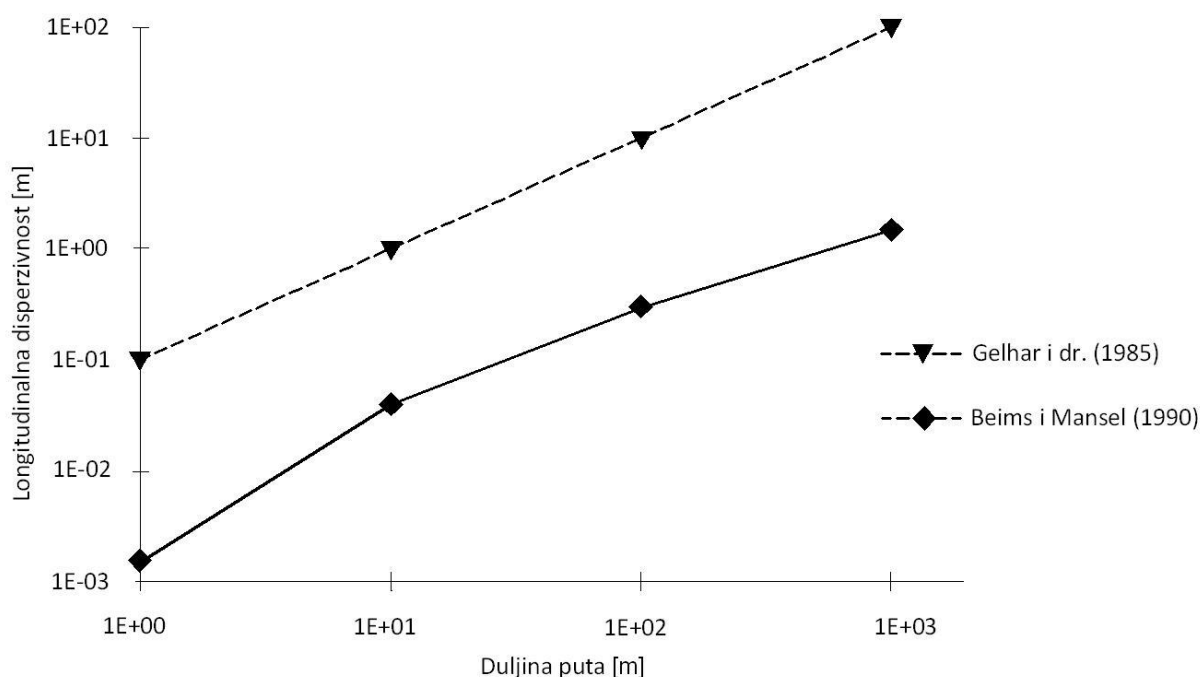
U 2D i 3D problemima koncept disperzije se generalizira. Kod transverzalne putanje u odnosu na smjer toka, osim koeficijenta α_L uvodi se i koeficijent transverzalne disperzivnosti α_T . Koeficijent transverzalne disperzivnosti je obično za (jedan) red veličine manji od longitudinalnog ($\alpha_T/\alpha_L = 0,1$). Time se dobiva znatno složenija formulacija, budući da se skalarni koeficijent D_{ef} zamjenjuje tenzorom disperzije \mathbf{D} :

$$\mathbf{D} = (\tau D_{mol} + \alpha_T v) \mathbf{I} + \frac{\alpha_L - \alpha_T}{v} \mathbf{v} \mathbf{v}^T \quad (2.21)$$

Elementi matrice \mathbf{vv}^T sadrže produkt komponenti brzina (vektorski produkt vektora stupca i vektora retka daju matricu). Uzima se u obzir da konstante u smjeru brzine imaju različite vrijednosti od konstanti u transverzalnom smjeru te da je vektor brzine \mathbf{v} promjenjiv u prostoru i vremenu. Primjenom tenzora disperzije dobiva se konačan izraz za pronos:

$$\mathbf{j} = -\mathbf{D}\nabla c \quad (2.22)$$

Vrijednost koeficijenta transferzalne disperzivnosti uobičajeno je manja od longitudinalne disperzivnosti. Obje vrijednosti bitno ovisi o veličini promatranog prostora u kojem se odvija pronos. Na slici 2.4 prikazana je ovisnost longitudinalne disperzivnosti o karakterističnoj duljini promatranog područja pronosa.



Slika 2.4 Ovisnost o mjerilu longitudinalne disperzije u proznoj sredini, promatrano od strane različitih autora

2.4. Jednadžba pronosa

Uzimajući u obzir konvekcija i difuziju/disperziju, protok (pronos) u x -smjeru poprima oblik:

$$j_x = -D \frac{\partial c}{\partial x} + vc \quad (2.23)$$

U koeficijentu D sadržani su utjecaji molekularne difuzije, zakrivljenosti strujnica i disperzije na regionalnom mjerilu. Analogno za y i z smjer te sumarno za sve smjerove u vektorskom zapisu:

$$\mathbf{j} = -\mathbf{D}\nabla c + \mathbf{v}c \quad (2.24)$$

Izraz 2.24 koristi se za zamjenu termina protoka u jednadžbi očuvanja mase 2.4, pa se za jednodimenzionalni slučaj dobiva:

$$\theta \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial c}{\partial x} - \mathbf{v}c \right) + q \quad (2.25)$$

U slučaju konstantnih brzina dobiva se uobičajeni oblik jednadžba pronosa:

$$\theta \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta D \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \theta v \frac{\partial c}{\partial x} + q \quad (2.26)$$

U slučaju kada je D konstanta odgovarajući izraz glasi:

$$\theta \frac{\partial c}{\partial t} = \theta D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \theta v \frac{\partial c}{\partial x} + q \quad (2.27)$$

Za višedimenzionalne probleme koristiti se operator ∇ pa za opći slučaj vrijedni jednadžba:

$$\theta \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla c - \mathbf{v}c) + q \quad (2.28)$$

Izraz 2.28 predstavlja *jednadžbu pronosa mase tvari*, koja je važeća za razne biokemijske tvari. Jednadžba je diferencijalna jednadžba drugog reda u prostoru i prvog reda u vremenu, te pripada grupi paraboličkih parcijalnih diferencijalnih jednadžbi. U slučaju konstantnih koeficijenata to je linearna jednadžba. Pojednostavljenje izvedeno za 1D jednadžbu može se upotrijebiti i za višedimenzionalne slučajeve:

$$\theta \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (\theta \mathbf{D}\nabla c) - \theta \mathbf{v} \cdot \nabla c + q \quad (2.29)$$

Uobičajeno usvojena pojednostavljenja u analizama strujanja kroz saturiranu zonu vodonosnika u porznoj sredini stijene međuzrnske poroznosti su: Nestišljivost protjecajne tekućine, homogenost vodonosnog sloja, jednodimenzionalnost ili dvodimenzionalnost i stacionarnost strujanja, konstantnost koeficijenta retardacije, reakcije i disperzivnosti. Također se pretpostavlja da unešeno onečišćenje ne mijenja homogeno polje brzina, te da je molekularna difuzija zanemarivo mala u odnosu na disperziju.

2.5. Početni i rubni uvjeti

Prethodno su objašnjeni osnovni teorijski i empirijski zakoni i kako se isti kombiniraju u cilju izvođenja diferencijalnih jednadžbi pronosa. Za većinu diferencijalnih jednadžbi može se naći više funkcija koje zadovoljavaju rješenje jednadžbe. Rješenje diferencijalne jednadžbe $du/ds=-u(s)$ definirano je analitičkim izrazom $u(s)=Cexp(-s)$ za sve vrijednosti varijable C . Takva rješenja zovu se *opća rješenja* i sadrže jednu ili više integracijskih konstanti (C u primjeru). Kako bi se ograničila domena rješenja, potrebno je definirati odgovarajuće početne i/ili rubne uvjete. Broj uvjeta, potrebnih da se dobije jedinstveno (partikularno) rješenje, uglavnom je određen redom diferencijalne jednadžbe. Za jednadžbe prvog reda potreban je jedan uvjet, dok jednadžbe drugog reda zahtijevaju poznavanje dva uvjeta.

Izraz početni uvjet obično se odnosi na varijablu vremena t i uvjet kada je $t=0$. Početni uvjeti primjerice predstavlja raspored potencijala u početnom trenutku. Početne uvjete je potrebno definirati ako je strujanje nestacionarno. Primjerice, početnim uvjetom $c(x,t=0)$ izražava se početna vrijednost koncentracije u vremenu $t=0$ za svaku točku promatranog područja.

Rubni uvjet vezan je uz prostorne varijable x, y ili z po rubu modeliranog područja. Njime se opisuju značajke granica koje omeđuju promatrani prostor i njihov utjecaj na promatrani tok. Rubni uvjet $c(x=0,t)=c_0$ pri $t>t_0$ izražava situaciju u kojoj je koncentracija konstantna na rubu modeliranog područja tijekom vremena t i nakon vremena t_0 .

Osnovna podjela rubnih uvjeta prikazana je u tablici 2.1. Prvi tip rubnih uvjeta naziva se *Dirichletov rubni uvjet* s kojim se definira vrijednost nepoznate varijable na rubovima poput raspodjele potencijala ili razina podzemne vode.

Tablica 2.1. Klasifikacija rubnih uvjeta

Naziv rubnog uvjeta	stanje za varijablu $u(s)$
Dirichlet	$u = u_1$
Neumann	$\partial u / \partial s$
Cauchy / Robin	$\alpha_0 u + \alpha_1 (\partial u / \partial s) = j$

Neumannov rubni uvjet opisuje gradijent koncentracije okomito na rub modeliranog područja, odnosno protok kroz taj rub (granicu). Kako je taj gradijent proporcionalan difuznom toku, Neumanovi rubni uvjeti se mogu opisati kao specifični difuzni tok.

Treći tip je *Cauchy / Robin* rubni uvjet s kojim se definira ukupni protok kroz granicu tj. zbroj konvektivnog i disperzivnog protoka. Ukupni protok je linearna kombinacija koncentracije c na rubu i promjene koncentracije na rubu $\partial c / \partial n$ te se može izraziti jednadžbama:

$$\alpha_0 c + \alpha_1 \frac{\partial c}{\partial n} = j \quad \text{za pronos mase ili} \quad (2.31a)$$

$$\alpha_0 T + \alpha_1 \frac{\partial T}{\partial n} = j_T \quad \text{za pronos topline} \quad (2.31b)$$

gdje je: α_0 , α_1 zadani koeficijenti; j , j_T zadani tok mase ili topline. U zadaćama vezanim uz analizu pronosa kroz porozne sredine vodonosnika, rubni uvjeti Cauchy/Robin tipa izražavaju vrijednosti hidrauličkog potencijala, tlaka, piezometarskog potencijala ili strujne funkciji.

Rubnih uvjeti mogu se opisati s konstantnim (stacionarnim) ili promjenljivim (nestacionarnim) vrijednostima u vremenu.

3. Reaktivni procesi

3.1. *Utjecaj odumiranja i razgradnje*

Organske tvari i sastojci podložni su procesima *razgradnje*, a ti procesi razgradnje posredovani su bakterijama. Procesu razgradnje su kompleksni procesi i ovise o uvjetima okoliša, primarno o temperaturi i u manjoj mjeri o tlaku. Jedan od glavnih uvjeta je i prisutnost kisika. U aerobnom okolišu dominiraju bakterije koje troše kisik odvojeno od organske tvari a produkti takvih procesa uvijek sadrže ugljični dioksid. U anaerobnom okolišu, kada se potroši postojeći kisik, druge vrste bakterije preuzimaju glavnu ulogu u razgradnji organskih tvari.

Izrazi *odumiranje i razgradnja* koristi se za fizikalne ili kemijske procese koji uzrokuju nestanak tvari ili biološku razgradnju tvari. Izrazi su u vezi s pojmom *radioaktivnog odumiranja*, a to je proces pretvorbe radionukleotida u srodne tvari. Kao posljedica kemijskih reakcija i raspadanja, u pravilu se javlja smanjenje ukupne mase tvari prilikom pronosa kroz sustav. Također je potrebno i uvesti pojam idealnog trasera koji prati gibanje vodnih čestica bez promjene (razgradnje) mase tokom vremena.

Pri opisu odumiranja i razgradnje uobičajeno se koristi izraz za gubitke q koji su proporcionalni gradijentu koncentracije c :

$$q = -\lambda c^n \quad (3.1)$$

gdje je: n eksponent (red razgradnje); λ konstanta razgradnje koja ovisi o uvjetima u okolišu promatranog sustava.

Fizikalna jedinica za λ ovisi o eksponentu n a za slučaj $n=1$ odgovarajuća jedinica za λ je $[1/T]$. Diferencijalne jednačbe 2.28 i 2.29 i izraz 3.1 imaju istu fizikalnu jedinicu $[M/T/L^3]$, pa se proširenjem tih izraza dobiva:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \mathbf{D} \nabla c - \nabla \cdot \mathbf{v} c - \lambda c^n \quad (3.2)$$

Na taj način razgradnja je uključuje u jednačbu pronosa. U slučaju odsustva konvekcije i difuzije proces razgradnje je izoliran pa se dobiva sljedeća jednačba:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\lambda c^n \quad (3.3)$$

To je obična diferencijalna jednačba a obzirom da je najutjecajni prvi red razgradnje ($n=1$) brzina procesa razgradnje je proporcionalna trenutnoj koncentraciji. Rješenje diferencijalne jednačbe 3.3 poprima oblik:

$$c = c_0 e^{-\lambda t} \quad (3.4)$$

uz početni uvjet $c(t = 0) = c_0$.

Eksponecijalna funkcija je dakle rješenje za razgradnju tvari s linearnim zakonom odumiranja. Vrijeme poluraspada $t_{1/2}$, predstavlja vremenski period u kojem se početna koncentracija (masa) neke tvari smanjuje na polovicu početne vrijednosti a primjenom izraza 3.4 dobiva se odnos između konstante razgradnje i vremena poluraspada $t_{1/2} = \ln(2)/\lambda$.

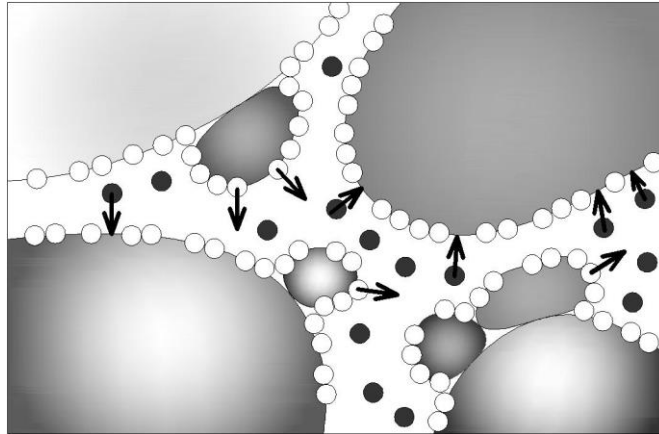
3.2. Izmjena tvari između krute i tekuće faze

Porozna sredina se sastoji od čvrste faze i barem jedne tekuće ili plinovite faze, a često sve tri zajedno. Čvrsta se faza može u mnogim situacijama promatrati kao kruta, dok se u nekim slučajevima uzima u obzir i njena deformacija. Proces izmjene tvari između faza važan je u svim prostornim sustavima, dok se procesi konvekcije, difuzije i disperzije izražavaju posebno sa krutu i posebno za tekuću fazu.

Pod određenim uvjetima, površina poroznog medija privlači čestice određenim kemijskim procesima. Takvi procesi, kao što su električna privlačnost i odbijanje te razne kemijske reakcije, mogu se razlučiti detaljnijim proučavanjem i izraziti općenitim izrazom *sorpcija*.

Izraz *adsorpcija* (eng: *adsorption*) je izraz za akumulacija tvari (čestica) na površinu čvrste (krute) ili tekuće faze (slika 2.5). Obrnuti proces oslobađanja tvari iz krute faze naziva se *desorpcija* (eng: *desorption*). Kada brzina adsorpcije postane jednaka brzini desorpcije nastupa adsorpcijska ravnoteža. Izraz *mobilizacija* za čestice efluenata je izraz za česticu koja je čvrsto vezana na površini krute faze na početku analiziranog vremenskog perioda, a koja se može mobilizirati (ponovno pokrenuti) i osloboditi za procese disperzije i konvekcije u slijedećem vremenskom periodu.

Važna relacija je odnos brzine procesa koji upravlja izmjenom tvari između krute i tekuće faze, sa procesom pronosa. Prema toj relaciji govori se o *brzoj adsorpciji*, ako je adsorpcija brža od procesa pronosa i o *sporjoj adsorpciji*, ako je adsorpcija sporija od pronosa. Prema tome karakterizacija adsorpcije ovisi o specifičnim situacijama između faza.



Slika 2.5 Prikaz procesa adsorpcije i desorpcije

Koncentraciju tekuće faze označavamo sa c , a sa c_s koncentraciju krute faze. Visoke ili niske koncentracije u jednoj fazi su obično povezane sa visokim ili niskim koncentracijama u drugoj fazi. Takva veza može se izraziti funkcionalom $c_s(c)$ u kojem je koncentracija krute faze dana u ovisnosti o koncentraciji tekuće faze. Koncentracije u jednoj fazi se prilagođava promjenama koncentracije u drugoj fazi. Ravnoteža koncentracija prikazuje se *adsorpcijskim izotermama*. Najjednostavniji primjer je *linearna izoterma*:

$$c_s = K_d c \quad (3.5)$$

gdje je: K_d koeficijent raspodjele kojim se određuje odnos između koncentracija krute i tekuće faze.

Komponente s jakom adsorpcijom imaju visok K_d i obratno. K_d ovisi i o tekućoj i o krutoj fazi. U glinama se primjerice može očekivati visoka adsorpcija zbog velikog omjera površine po volumenu i zbog visokog električnog potencijala. Minerali glina imaju višak različitih negativnih naboja pa pogoduju adsorpciji kationa. Vrijednosti K_d istraživane su za različite kemijske komponente, za anorganske i organske tvari te različite vrste efluenata a njihove vrijednosti se pružaju preko više redova veličina.

Adsorpcija i desorpcija se ne dešavaju direktno na površini krute faze nego na organskim materijalima koji su vezani uz nju.

Općenita jednačba za brzu adsorpciju je *Freundlichova* izoterma izražena sljedećom jednačbom:

$$c_s = \alpha_{F1} c^{\alpha_{F2}} \quad (3.6)$$

gdje je: α_{F1} , α_{F2} koeficijenti (α_{F1} je obično manji od 1).

Pri $\alpha_{F2} = 1$ dobiva se linearna povezanost koncentracija u obje faze.

U jednadžbu jednodimenzionalnog toka 2.4, adsorpcija se može uključiti uvođenjem zamjenskih izraza. Uzimajući u obzir pronos tvari uzrokovan konvekcijom i difuzijom, uz linearnu razgradnju (prvog reda) i odsustvo izvora/ponore, dobiva se izraz za ravnotežu u obje faze:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}(\theta c) &= -\nabla \cdot (\theta \mathbf{j}) - \theta \lambda c - e_{fs} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho_b c_s) &= -\nabla \cdot (\rho_b \mathbf{j}_s) - \rho_b \lambda_s c_s - e_{sf}\end{aligned}\tag{3.7a,b}$$

Gdje je: c , c_s koncentracije, θ poroznost, e_{fs} , e_{sf} koeficijenti izmjene adsorpcije.

Član izmjene sa indeksom fs označava gubitak odnosno prelazak iz pokretne (mobilne) u nepokretnu fazu, a indeksna oznaka sf upućuje na obrnuti slučaj. Jednadžba 4.10b opisuje bilancu mase za krutu fazu porozne sredine. Obzirom da je koncentracija tvari na površini krute faze izražena kao dio mase, član ρ_b se mora uzeti u obzir s ciljem zadovoljenja bilance mase tvari. ρ_b [kg/m^3] predstavlja volumnu gustoću porozne sredine definiranu s izrazom:

$$\rho_b = (1 - \theta) \rho_s\tag{3.8}$$

gdje je: ρ_s gustoća čvrste faze porozne sredine bez pora.

Na desnoj strani jednadžbe 4.10b \mathbf{j}_s označava protoke u području krute faze. U poroznoj sredini vodonosnika konvektivni ili difuzijski protoci u krutoj fazi mogu se zanemariti. Kako izraz 3.7 označava ukupnu bilancu mase, izmjene moraju biti jednake pa u dvofaznim sredinama ponori jedne faze predstavljaju izvore za drugu fazu. Prema tome, sve što je dobiveno kroz proces adsorpcije u jednoj fazi mora se izgubiti u drugoj fazi pa vrijedi sustav jednadžbi:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}(\theta c) &= -\nabla \cdot (\theta \mathbf{j}) - \theta \lambda c - e_{fs} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho_b c_s) &= -\nabla \cdot (\rho_b \mathbf{j}_s) - \rho_b \lambda_s c_s + e_{fs}\end{aligned}\tag{3.9a,b}$$

3.3. Retardacija

U slučaju brze adsorpcije izrazi 3.9a,b teško se mogu kvantificirati i promjenjivi su u vremenu i prostoru. Za analizu procesa pronosa prikladno je koristiti matematičku formulaciju kojom se brišu članovi e_{fs} i e_{sf} . Ako se zanemari odumiranje i razgradnja, zbrajanjem izraza 3.9a,b dobiva se:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta c + \rho_b c_s) = -\nabla \cdot (\theta \mathbf{j}) - \nabla \cdot (\rho_b \mathbf{j}_s) \quad (3.10)$$

Zbrajanjem je također eliminirana i nepoznata varijabla c_s . U slučaju brze adsorpcije koristi se relacija za izotermu 3.5 a jednačba 3.10 se izražava u obliku:

$$\frac{\partial}{\partial t}(R\theta c) = -\nabla \cdot (\theta \mathbf{j}) - \nabla \cdot (\rho_b \mathbf{j}_s) \quad ; \quad R = 1 + \frac{\rho_b c_s}{\theta c} \quad (3.11)$$

gdje je: R koeficijent retardacije. Koeficijent retardacije je mjera kašnjenja neke tvari u odnosu na konvektivni tok podzemne vode. Postoje i alternativne jednačbe važeće za vodonosnike s konstantnom poroznosti, kada se koeficijent retardacije može izlučiti izvan parcijalne derivacije po vremenu:

$$R\theta \frac{\partial}{\partial t} c = -\nabla \cdot (\theta \mathbf{j}) - \nabla \cdot (\rho_b \mathbf{j}_s) \quad ; \quad R = 1 + \frac{\rho_b \frac{\partial c_s}{\partial c}}{\theta} \quad (3.12)$$

U jednačbi 3.12 pretpostavljena je konstantnost parametara θ i ρ_b u vremenu. Ukoliko je $R=1$, retardacija ne utječe na pronos, dok za $R>1$ utječe.

U slučaju linearne izoterme $c_s/c=K_d$, nema razlike u koeficijentu R koji se pojavljuje u izrazima 3.11 i 3.12:

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} K_d \quad (3.13)$$

Pri konstantnoj poroznosti θ koeficijent retardacije je također konstantan. Vrijednosti koeficijenata retardacije se u praktičnim slučajevima pojavljuju u širokom rasponu vrijednosti, od 1 pa sve do 10^7 .

U općem slučaju koeficijent retardacije R ovisi o koncentraciji c i poroznosti θ , te je promjenjiva veličina u vremenu i prostoru. Za jednačbu izoterme tipa Freundlich dobiva se:

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \alpha_{F1} \alpha_{F2}(c)^{\alpha_{F2}-1} \quad (3.14)$$

U sustavima sa prisustvom jedne stacionarne faze, kao u slučaju podzemnih vodonosnika, izrazi 3.10 i 3.11 imaju prednost u usporedbi sa izrazom 3.9a,b. Ukoliko je kruta faza fiksirana u prostoru (stacionarna), a procesi konvekcije i difuzije nisu prisutni ($\mathbf{j}_s=0$), dobiva se sljedeća diferencijalna jednačba za nepoznatu varijablu koncentracije c :

$$R\theta \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (\theta \mathbf{D} \nabla c) - \theta \mathbf{v} \cdot \nabla c \quad (3.15)$$

Na desnoj strani jednadžbe nalaze se izrazi za difuziju, disperziju i konvekciju u tekućoj fazi, ali nema izraza za krutu fazu. Kada se nađe rješenje jednadžbe 3.15, prostorne i vremenske promjene druge nepoznate varijable c_s mogu se izračunati uz pomoć izoterme. Dijeljenjem s θ jednadžba 3.15 poprima oblik:

$$R \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c) - \mathbf{v} \cdot \nabla c \quad (3.16)$$

U daljnjoj interpretaciji izraz 3.15 se uspoređuje s izrazom 2.29. Kako se može uočiti, koeficijent retardacije R u jednadžbi 3.15 ustvari „produljuje vremensku skalu“ odnosno kao da usporava protjecanje vrijeme u procesu pronosa. Matematički to se može zapisati u obliku $R \cdot \partial/\partial t = \partial/\partial(t/R)$. Koristeći novu vremensku skalu $\bar{t} = tR$, može se reći da je prostorni raspored koncentracije „retardirane“ tvari u vremenu \bar{t} jednak prostornoj raspodjeli koncentracije trasera u vremenu t .

U slučaju retardacije, adsorpcija nema utjecaj na stacionarni raspored koncentracije. To se može vidjeti i iz izraza 3.15 i 3.16, gdje lijeva strana nestaje a koncentracija c se definira temeljem rješenja preostalih članova jednadžbe na desnoj strani na kojoj nema koeficijenta retardacije.

U jednadžbe se može uključiti i član odgovoran za razgradnju. Time jednadžbe 3.10 i 3.11 prelaze u jednadžbe 3.17 i 3.18:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta c + \rho_b c_s) = -\nabla \cdot (\theta \mathbf{j}) - \theta \lambda c - \nabla \cdot (\rho_b \mathbf{j}_s) - \rho_b \lambda_s c_s \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(R\theta c) = -\nabla \cdot (\theta \mathbf{j}) - \nabla \cdot (\rho_b \mathbf{j}_s) - \tilde{R} \theta \lambda c \quad ; \quad \tilde{R} = 1 + \frac{\rho_b \lambda_s c_s}{\theta \lambda c} \quad (3.18)$$

Ako je konstanta linearne razgradnje u obje faze ista (što je slučaj kod radioaktivnog raspadanja), oba R koeficijenta su jednaka, odnosno $\tilde{R} = R$. Za slučaj stacionarne krute faze porozne sredine jednadžba 3.16 transformira se u sljedeći izraz:

$$R \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c) - \mathbf{v} \cdot \nabla c - R \lambda c \quad (3.19)$$

4. Model strujanja i pronosa u stijenama međuzrnske poroznosti

Matematičke jednadžbe kojima se opisuje tok podzemnih voda, kao i procesi pronosa izvode se iz temeljnih zakona o održanju mase uz usvajanje koncepta reprezentativnog elementarnog volumena (REV) porozne sredine. Zakon o održanju mase (jednadžba kontinuiteta) kombinirati se s drugim matematičkim izrazima procesa za potrebe dobivanja diferencijalnih jednadžba toka podzemnih voda i pronosa u njima.

Strujanje vode kroz poroznu sredinu (sa međuzrnskom poroznošću) povezano je sa svojstvima vode, svojstvima porozne sredine i razlikom potencijala, što se može prikazati Darcyevim zakonom:

$$q_i = -\mathbf{K}_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (4.1)$$

gdje je: q_i specifični protok; \mathbf{K}_{ij} tenzor (drugog reda) koeficijenta filtracije porozne sredine; h potencijal (piezometarska razina); x_j koordinate u Kartezijevom koordinatnom sustavu.

Opći oblik jednadžbe koja opisuje tok blago stišljivog fluida u nehomogenom anizotropnom vodonosniku može se dobiti kombiniranjem Darcyevog zakona sa jednadžbom kontinuiteta. Opći oblik jednadžbe strujanja napisan u obliku Kartezijevog tenzora glasi:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mathbf{K}_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} + W^* \quad (4.2)$$

gdje je: S_s koeficijent specifičnog uskladištenja; t vrijeme; W^* volumetrijski protok po jedinici volumena (pozitivan za iznošenje, negativan za unos).

Jednadžba 4.2 općenito se može primijeniti ukoliko prevladavaju izotermalni uvjeti, ako se porozna sredina deformira samo u vertikalnom smjeru, ako volumen pojedinih čestica sredine ostaje konstantan tokom deformacije, ako se može primijeniti Darcyev zakon (razlika u potencijalima je jedina pokretačka sila) te ako su karakteristike fluida (gustoća i viskoznost) homogene i konstantne veličine. Karakteristike vodonosnika mogu prostorno varirati, a volumetrijski protok (W^*) može varirati u vremenu i prostoru.

Ako je vodonosnik relativno tanak u odnosu na lateralno (horizontalno) prostiranje, moguće je pretpostaviti da se strujanje odvija u dvije dimenzije (Dupuitova hipoteza). Ova pretpostavka omogućava da se trodimenzionalna jednadžba toka zamijeni na dvodimenzionalno prostorno strujanje, za koje je moguće uvesti niz pojednostavljenja.

Jednadžba kojom se opisuje dvodimenzionalno prostorno strujanje homogene tekućine (kapljevine) u vodonosniku pod tlakom slična je jednadžbi 4.2 i glasi:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\mathbf{T}_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) = S \frac{\partial h}{\partial t} + W \quad (4.3)$$

gdje je: S koeficijent uskladištenja; \mathbf{T}_{ij} tenzor transmisivnosti; $T_{ij} = K_{ij}b$; b debljina saturiranog vodonosnog sloja; $W = W^*b$ volumenski protok po jedinici površine.

Kada se jednadžba 4.3 primjeni na vodonosnik s slobodnim vodnim licem, podrazumijeva se usvajanje Dupouitove pretpostavke: tečenje je u horizontalnom sloju, ekvipotencijale su vertikalne linije, horizontalni hidraulički gradijent je jednak nagibu vodnog lica. Treba napomenuti da se u vodonosniku sa slobodnim vodnim licem debljina zasićenog sloja mijenja sa promjenom razine slobodnog vodnog lica. Stoga se i transmisivnost može mijenjati u prostoru i vremenu (npr., $T_{ij} = K_{ij}b$, gdje je $b(x,y,t) = h - h_b$, h_b je geodetska razina dna vodonosnika).

Članovi vektorskog produkta tenzora koeficijenta filtracije nestaju kada se koordinatne osi poklope sa glavnim koordinatnim osima tenzora. To znači da je $K_{ij} = 0$ kada je $i \neq j$. Prema tome, jedini članovi tenzora koeficijenta filtracije koji imaju vrijednost različitu od nule su K_{xx} i K_{yy} . Pod ovom pretpostavkom, jednadžba 4.3 se pojednostavljuje u oblik koji odgovara dvodimenzionalnom toku:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) = S \frac{\partial h}{\partial t} + W \quad (4.4)$$

U nekim slučajevima, svojstva tekućine, kao što su gustoća i viskoznost, mogu značajno varirati u vremenu i/ili prostoru. Varijacije se mogu očekivati na mjestima značajne promjene temperature ili koncentracije otopljene tvari. Kada tekućina ima heterogena svojstva poveznice između razine vodnog lica, hidrauličkih tlakova i brzina toka, nisu toliko jasne. U takvim slučajevima jednadžbu toka nije moguće rješavati temeljem potencijala (piezometarske razine), već je jednadžbu toka potrebno referencirati na tlak tekućine, gustoću tekućine i propusnost porozne sredine kao:

$$(\rho S_{0p}) \frac{\partial p}{\partial t} + \left(\varepsilon \frac{\partial p}{\partial \omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{k_{ij} \rho}{\mu} \right) \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j} \right) \right] = Q_p \quad (4.5)$$

gdje je S_0 specifično tlačno uskladištenje; ρ gustoća tekućine; p tlak tekućine; Q_p maseni ponor ili izvor; k_{ij} propusnost unutar porozne sredine (tenzor drugog reda); μ dinamička

viskoznost tekućine; g gravitaciono ubrzanje; ω udio utopljene tvari. Specifično uskladištenje pod tlakom povezano je sa specifičnim koeficijentom uskladištenja temeljem izraza: $S_s = \rho|g|S_{0p}$.

Strujanje podzemnih voda glavni je uzrok transporta i miješanja tvari otopljenih u podzemnoj vodi. Specifični protok izračunat u jednadžbi 4.1 naziva se Darcy-eva brzina. Takav naziv može navesti na krivi trag, budući da q_i ne predstavlja stvarnu brzinu gibanja vode nego volumetrijski protok po jedinici površine poprečnog presjeka. Da bi se izračunala stvarna brzina procjeđivanja potrebno je specifični protok q_i podijeliti sa efektivnom poroznošću karakterističnom za promatranu poroznu sredinu θ :

$$V_i = \frac{q_i}{\theta} = -\frac{K_{ij}}{\theta} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (4.6)$$

gdje je: V_i stvarna brzina procjeđivanja.

Za protok tekućina različitih gustoća, stvarna brzina je dana kao:

$$V_i = -\left(\frac{k_{ij} \theta \rho}{\mu}\right) \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_j}\right) \quad (4.7)$$

Jednadžba koja opisuje pronos otopljenih tvari u toku podzemnih voda može se dobiti iz jednadžbe kontinuiteta uzimanjem u obzir svih utjecaja u i na reprezentativni elementarni volumen. Poopćeni izraz jednadžbe pronosa uz obuhvat reakcijskih procesa otopljene tvari glasi:

$$\frac{\partial(\theta c)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta \mathbf{D}_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta c \mathbf{V}_i) - c^* W^* + REAK \quad (4.8)$$

gdje je: c volumetrijska koncentracija (masa otopljene tvari po jedinici volumena tekućine); \mathbf{D}_{ij} tenzor koeficijenta hidrodinamičke disperzije; c^* koncentracija otopljene tvari u izvoru; $REAK$ reakcijski proces (u slučaju linearne razgradnje $REAK = \lambda \theta c$).

Koeficijent hidrodinamičke disperzije D_{ij} definiran je kao suma mehaničke disperzije i molekularne difuzije:

$$D_{ij} = \alpha_{ijmn} \frac{V_m V_n}{|V|} + D_{ef} \quad i, j, m, n = 1, 2, 3 \quad (5.11)$$

gdje je: α_{ijmn} disperzivnost porozne sredine (u općem slučaju tenzor četvrtog reda); V_m, V_n komponente stvarne brzine u m i n smjerovima; D_{ef} efektivni koeficijent molekularne difuzije; $|V|$ apsolutna vrijednost vektora brzine strujanja $|V| = \sqrt{V_x^2 + V_y^2 + V_z^2}$).

Mehaničku disperziju treba gledati kao funkciju unutarnjih obilježja porozne sredine, kao na primjer, heterogenost koeficijenta filtracije i poroznosti. Izotropnost porozne sredine obuhvaća se konstantama longitudinalne i transverzalne disperzivnosti α_L i α_T koje su linearno povezane s koeficijentom longitudinalne i transverzalne disperzije odnosima: $D_L = \alpha_L |V|$ i $D_T = \alpha_T |V|$.

C

MODELIRANJE PROCESA U EKO SUSTAVU

1. Uvod

Oko 1 500 000 vrsta obitava na zemaljskoj kugli i sve su međusobno povezane. To zasigurno zahtijeva sustavno modeliranje. Ipak postoje karakteristični ekološki sustavi u kojem životne zajednice imaju neki oblik autonomije od vrsta koje obilježavaju neki drugi ekološki sustava. Primjerice vrste koje obitavaju na kopnu i u vodi. Potonje možemo podijeliti na fitoplanktone (biljke) i zooplanktoni. Dalje zooplanktone koji su herbivori ili karnivori itd... Definiranjem interakcijskih odnosa između takovih, većih cjelovitih grupa, kao i njihove odnose sa okolinom predstavlja okosnicu ekološkog modeliranja.

2. Populacijski model

Ekološki sustav obuhvaća međusobno povezane životinje, biljke, nutrijente i metaboličke produkte. Najjednostavniji ekološki model opisuje samo jednu varijablu-vrstu i to temeljem jedne jednačbe poput:

$$\frac{dP}{dt} = rP \left(1 - \frac{P}{K} \right) \quad (2.1)$$

gdje je: r , K konstante; P populacija (broj jedinki) analizirane varijable odnosno vrste.

Gore navedena jednačba zove se „logistička“ u kojoj konstanta r predstavlja brojevni kvantifikator kojim se definira brzinu prirasta od P a konstanta K je potencijalni kapacitet vrste odnosno maksimalni broj jedinki vrste P koji se može razviti. Ukoliko K poprimi vrijednost P dolazi do trenutnog prekida rasta i stacioniranja procesa koji se u realnosti ustvari nikada ne ostvaruje.

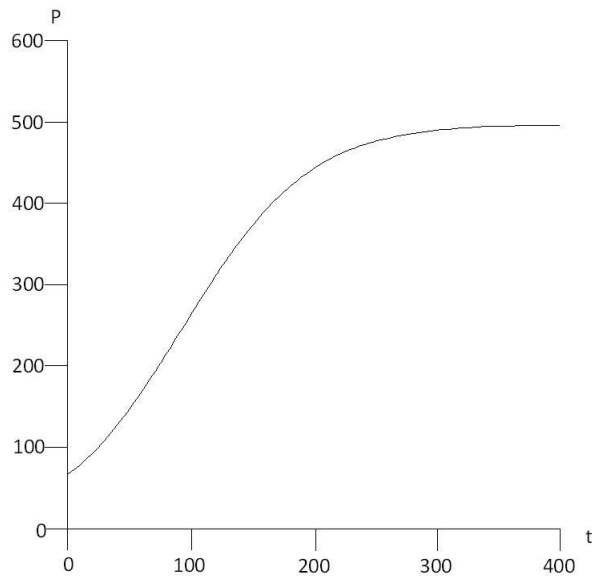
Primjer rezultata korištenja jednačbe 1 u slučaju povećanja broja stanovnika u SAD dana je u tablici 2.1. te na slici 2.1. Očigledno je da bliskost sa logističkom jednačbom predviđenog i izmjerenog broja stanovništava ima zahvaliti „dobrom“ izboru konstanti r i K . Vrijednosti tih konstanti dobiveno je temeljem baždarenja temeljem većeg niza podataka o broju stanovnika iz prethodnih godina.

Ukoliko se primjerice usvoji vrlo velika vrijednost za konstantu K jednačba 2.1 poprima oblik

$$P = P_0 e^{-rt} \quad (2.2)$$

gdje je: P_0 broj jedinki u trenutku t_0 .

Očigledno je da će vrijednost P nakon velikog broja godina t poprimiti vrlo veliku i intuitivno nerealnu vrijednost. Prema tome koeficijentom K uzet je u obzir cijeli niz čimbenika koji su zasigurno utjecali na razvoj P kroz analizirani period, poput svjetskih ratova, otkrića kontracepcijskih pilula itd. Nemogućnost opisivanja, a u realnosti postojećeg, velikog broja interakcijskih veza unutar realnog ekološkog sustava, otvara vrata upravo ovakvom jednostavnom matematičkom modeliranju.



Slika 2.1 – rezultati korištenja logističke jednadžbe 2.1 u analizi povećanja broja stanovnika u SAD

Tablica 2.1 - rezultata korištenja jednadžbe 1 u analizi povećanja broja stanovnika u SAD

Godina	t	P(t)- model	P(t) - mjereno
1900	0	76.1	76.1
1910	10	89	92.4
1920	20	103.64	106.5
1930	30	120.97	123.1
1940	40	138.21	132.6
1950	50	159.32	152.3
1960	60	179.96	180.7
1970	70	203	104.9
1980	80	227.12	226.5
1990	90	251.9	259.6
2000	100	276.9	281.4
2010	110	301.6	?
2020	120	325.6	?

Očigledno je da će vrijednost P nakon velikog broja godina t poprimiti vrlo veliku i intuitivno nerealnu vrijednost. Prema tome koeficijentom K uzet je u obzir cijeli niz čimbenika koji su zasigurno utjecali na razvoj P kroz analizirani period, poput svjetskih ratova, otkrića kontracepcijskih pilula itd. Nemogućnost opisivanja, a u realnosti postojećeg, velikog broja interakcijskih veza unutar realnog ekološkog sustava, otvara vrata upravo ovakvom jednostavnom matematičkom modeliranju. Logistička jednadžba 2.1 rješava se separacijom varijabli sa konačnim rješenjem

$$P(t) = \frac{P_0}{\frac{P_0}{K} + e^{-rt}} \quad (2.3)$$

Mogući su i složeniji oblici logističke jednadžbe koji su „opterećeni“ sa još više konstanti sa kojima se omogućuje dodatno poboljšanje u koreliranju izmjerenih i upotrebom jednadžbe dobivenih vrijednosti. Primjerice:

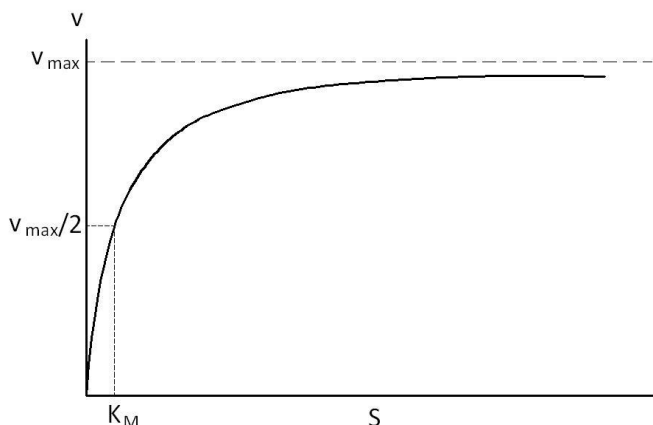
$$\frac{dP}{dt} = -rP + P(t-T) \left(\alpha + \beta \left[1 - \left(\frac{P(t-T)}{K} \right)^\gamma \right] \right) \quad (2.4)$$

gdje je: r rata odumiranja; α, β, γ koeficijenti modela.

U numeričkoj implementaciji jednadžbe 2.4 potrebno je paziti na eksplicitne uvjete nepostojanja negativne vrijednosti jedinka te da se nakon postizanja vrijednosti $P = 0$ ta vrijednost mora zadržati.

3. Michaelis-menten kinetika

Michaliss-Mentenov izraz kojim se izvorno opisuje kinetika enzimske reakcije vrlo je raširene primjene u ekološkim modelima zbog čega se na nju skreći i posebna pažnja. Autori su došli do spoznaje da se krivulja rate inicijalne reakcije nasuprot molekularne koncentracije poprima uvijek jedan te isti oblik. U njihovom eksperiment količina enzima je držana konstantnom a koncentracija supstrata (određeni set molekula) je graduirano povećavana. Rezultati eksperimenta su pokazivali povećanje brzine reakcije sve do asimptotskog postizanja maksimuma (slika 2.2).



Slika 2.2 Michaelis-Menton-ov izraz u njegovoj originalnoj formi (apscisna os označava koncentraciju supstrata a ordinatna os brzinu reakcije)

Izvod Michaelis-Mentenovog izraza u duhu biokemije ima slijedeći smisao. Proizvodnja produkta P iz supstrata S uz pomoć enzima E ostvaruje se tek nakon fizičkog kontakta između E i S te formiranja enzimsko-supstratnog kompleksa ES :



gdje je: k_1 , k_{-1} , k_2 konstante za asocijaciju enzima i supstrata, disocijaciju neizmijenjenog supstrata od enzima te disocijacija produkta (izmijenjeni supstrat) od enzima.

Opća reakcijska rata (v) je limitirana sa korakom reakcije iz ES u $E+P$ a ovisi o vrijednosti k_2 te o koncentraciji enzima koji ima već vezani supstrat $[ES]$. Uglate zagrade imaju značenje koncentracije. Prema tome moguće je napisati jednostavan izraz:

$$v = k_2 [ES] \quad (3.2)$$

Potrebno je ukazati na dvije pretpostavke izložene metodologije. Beskonačne zalihe supstrata, $[S] \gg [E]$ i stacionarnost koncentracije $[ES]$ uslijed jednake brzine razgradnje i formiranja $[ES]$. Formiranje $[ES]$ ovisi o konstanti k_1 te o raspoloživosti $[E]$ i $[S]$. Razgradnja $[ES]$ može se odvijati u dva koraka, kao konverzijom supstrata S do produkta P ili nereaktivnom disocijacijom supstrata S iz kompleksa ES . U oba slučaja $[ES]$ je vrlo bitan. Zbog toga se za slučaj stacionarnog (ravnotežnog) stanja može i pisati izraz:

$$k_1[E][S] = k_{-1}[ES] + k_2[ES] = (k_{-1} + k_2) [ES] \quad (3.3)$$

odnosno,

$$\frac{k[E][S]}{k_{-1} + k_2} = [ES]$$

Pri čemu se sve tri konstante k_1 , k_2 i k_3 pojavljuju sa iste strane izraza. Njihovim združivanjem u samo jednu konstantu, tzv. Michaelis-Mentenovu konstantu k_m :

$$\frac{k_{-1} + k_2}{k_1} = k_m \quad (3.4)$$

Čime se nakon njezinog uvrštavanja dobiva izraz.

$$\frac{[E][S]}{k_m} = [ES] \quad (3.5)$$

Ukoliko se ukupni-totalni enzim označi sa E_0 tada vrijedni jednakost:

$$[E_0] = [E] + [ES] \quad (3.6)$$

odnosno

$$[E] = [E_0] - [ES] \quad (3.7)$$

i supstitucijom za $[E]$ u gornjem izrazu dobiva se :

$$\frac{[E_0][S]}{S + k_m} = [ES] \quad (3.8)$$

Daljnjom supstitucijom $[ES]$ u jednadžbu za v dobiva se:

$$v = k_2 \frac{[E_0][S]}{[S] + k_m} \quad (3.9)$$

Maksimalna rata koju možemo označiti sa v_m postignuti će se kada sve enzimске molekule imaju vezani supstrat. Uz zadovoljenje pretpostavke u kojoj je $[S]$ puno veći od $[E]$ razumna je i pretpostavka da će se sav raspoloživi E naći u formi ES te da će vrijediti jednakost $[E_0] = [ES]$. Zamjenom v_m za v te $[E_0]$ za $[ES]$ u izrazu $v = k_2 [ES]$ dobiva se $v_m = k_2 [E_0]$. Eliminacijom $[E_0]$ dobiva se i izvorni oblik Michaelis-Mentenove jednadžbe :

$$v = \frac{v_m [S]}{[S] + k_m} \quad (3.10)$$

Ukoliko se za vrijednost v usvoji vrijednost polovice maksimalne rate $v_m/2$ gornja jednadžbe će dati izraz:

$$k_m = [S] \quad (3.11)$$

Time se pokazalo da je konstanta k_m nekog enzima ustvari supstratna koncentracija pri kojoj se reakcija odvija sa intenzitetom jednakim polovici maksimalne rate. U smislu promatranja enzimске reakcije, k_m je indikator afiniteta enzima prema reakcijskom supstratu a samim tim i stabilnosti enzimsko-supstratnog kompleksa.

Pri malom $[S]$ raspoloživost supstrata predstavlja ograničavajući faktor rasta. Prema tome, što se dodaje više supstrata povećava se i inicijalni rast intenziteta reakcije (brza konverzija zaključno do produkta). Pri rati od $k_m = [S]$ veza sa supstratom je ostvarena na 50% raspoloživih pozicija. Pri povećanju $[S]$ teoretski se postiže i točka u kojoj svi raspoloživi enzimi imaju vezani supstrat a daljnje povećanje koncentracije neće uzrokovati i daljnje povećanje reakcijske rate (postizanje asimptotskog režima).

U širem kontekstu promatranja ekološke fenomenologije a vezano za proizvoljni nutrijent N Michaelis-Mentenova jednadžba poprima oblik

$$\text{konzumacija nutrijenata} = \frac{\alpha N}{k + N} \quad (3.12)$$

u kojem je maksimalni intenzitet konzumacije nutrijenata dan putem vrijednosti α koja ne može biti prekoračena. Primjerice, što se više apsorbira raspoloživi nutrijent od strane fitoplanktona, to se više povećava gustoća njegova populacije, no istovremeno se i smanjuje intenzitet penetrirane svjetlosti kroz morski stupac a čime se usporava daljnji rast populacije.

Dakako da primjena Michaelis-Mentonove kinetike ima punu primjenu na globalnim relacijama kojima se obuhvaća ukupni nutrijentski sadržaj a na lokalnoj razini vrijede složeniji relacijski odnosi karakteristični upravo za tu dubinu.

Prema tome, ukoliko se dosegne određena količina nutrijentata, limitirajući efekt interpretiran putem Michaelis-Mentenovog izraza dominirati će cijelim procesom.

Michaelis-Mentenov izraz sadrži dva parametra, α (maksimalna održiva rata konzumacije koja korespondira vrijednosti v_m za enzime) i k (količina nutrijenta pri kojoj konzumacija dosiže polovicu maksimuma - odgovara konstanti k_m) koja korespondira vrijednosti konstanti enzimske rate k_m .

4. Model ekosustava

Razlikovne karakteristike u modeliranju ekosustava naspram modeliranja klasičnog fizikalnog sustava. Bitna karakteristika do sada prikazanog pristupa je raspisivanje jednadžbi balansa koji je uobičajen i u formulaciji fizikalnih zakona poput zakona o očuvanju količine gibanja, mase itd... No u ekologiji ne postoje tako čvrsti zakoni – aksiomi, već se u njima pokušava što bolje opisati tok energije, nutrijenata ili kemijskih varijabli poput nitrata. U posljednje vrijeme došlo se do spoznaje da modeliranje koje se bazira isključivo na analizi toka energije

ne daje zadovoljavajuće rezultate. Isto tako pokazalo se da je za opis ponašanja pojedine komponente ekosustava potrebno definirati efekte zaslužne za rast odnosno odumiranje te komponente. Direktne veze sa drugim članovima odnosno komponentama istog sustava te ponori i/ili izvori također je uobičajeno uzeti u obzir. Pri takvom pristupu svaka komponenta ima svoju jednadžbu kojom se opisuje sam proces promjene njene „koncentracije“ u vremenu, generalno sa slijedećom strukturom:

$$\begin{aligned} \text{Rata rasta komponente } X &= \\ &= (\text{pozitivna konstanta}) * X + (\text{negativna konstanta}) * X + \text{izvori} + \text{interakcije} \end{aligned}$$

Prvi član predstavlja faktor rasta (kroz hranjenje i rast putem konzumacije i internog metabolizma nutrijenata). Drugi član predstavlja faktor odumiranja - razgradnje (kroz prirodnu smrt, podlijeganje predatorima, disipacija kroz interni metabolizam. Izvori se pojavljuju uslijed mobilnosti od X koji može migrirati u područje analiziranog problema ili se kreirati putem bio-kemijskih reakcija. Zadnjim članom se opisuje činjenica da ono što se dešava drugim komponentama ekološkog sustava može imati utjecaj i na komponentu X .

Primjerice jednadžba 2.1 je jedna populacijska nula-dimenzionalna jednadžba (model) sa jednom varijablom kojom se može opisati bujanje fitoplanktona uz istovremeno smanjenje penetracije svjetlosti kroz morski stupac (samozasjenjivanje). Mnogi modeli ne analiziraju prostornu migraciju analiziranih ekoloških varijabli i nazivaju se točkasti modeli ili nuladimenzionalni modeli.

U navedenoj matematičkoj formulaciji pojavljuju se i konstante za koje je potrebno odrediti vrijednosti, primjerice putem mjerenja u naravi.

4.1. Ekosustav sa dva člana (predator – plijen)

Populacija pojedine vrste može se razvijati na tri načina: bez ograničenja, periodički ili se asimptotski približavati nekoj vrijednosti. Logističko ponašanje prezentirano u prethodnom poglavlju primjer je asimptotskog približavanja maksimalnoj konačnoj vrijednosti.

Najjednostavniji biološki populacijski model koji sadrži dva člana zove se predator-plijen model a matematička formulacija dana je slijedećim izrazima:

$$\text{rata promjene } X = \frac{dX}{dt} = aX - cXY \quad (4.1)$$

$$\text{rata promjene } Y = \frac{dY}{dt} = -bY + dXY \quad (4.2)$$

Matematičko rješenje ove dvije jednačbe u zatvorenoj formi je (osim trivijalnog rješenja) :

$$a \ln Y + b \ln X - cY - dX = \text{konst.} \quad (4.3)$$

Vrijednosti omjera $b/d=X$ i $a/c=Y$ dobivaju se u slučaju da je rast plijena i predatora jednak 0.

Za ilustraciju daje se kvantitativan komentar na razvoj biomase ili broja jedinki analiziranih varijabli-komponenti (predator, plijen): X (plijen) se razvija kroz konzumaciju nutrijenata koji nisu eksplicitno uvučeni u prikazane jednačbe. Rata rasta definirana je konstantom a . S druge strane, Y (predator) hrani se sa X i to dinamikom koja je kvantificirana sa konstantom c . Ukupna rata (brzina) rasta X je vođena kroz ta dva kompetitivna efekta. Y (predator) odumire sa ratom koja je kvantificirana konstantom b a razvija se temeljem hranjenja sa X i to sa ratom kvantificiranom konstantom d . Važno je primijetiti da iako se c i d odnose na isti proces (Y se hrani sa X), razlikuje u tom da c predstavlja efekt na plijen, a d na predator.

Ukoliko je broj jedinki predatora Y malen, broj jedinki plijena X će se razvijati sa „povećanom“ ratom. Paralelno sa povećanjem X , koji predstavlja hranu za Y , povećavati će se i Y pa će doći do stagnacije rasta X i postizanja asimptotske vrijednosti X_{max} . Obzirom na još uvijek prisutan razvoj Y i dalje će se smanjivati X a što opet dovodi da redukcije raspoložive hrane za Y . Zbog smanjenja raspoložive hrane, Y će početi stagnirati u rastu, te će nakon postizanja svog maksimuma Y_{max} nastaviti s padom vrijednosti Y , a što opet omogućava regeneriranje i razvoj populacije X . Očigledno je da time ciklus ponavlja ispočetka.

Dodatnim članovima na desnoj strani jednačbi moguć je i sofisticiraniji opis kompleksnih relacijskih odnosa između predatora i plijena.

Nakon određenog perioda vremena moguće je postizanje ravnotežnog stanja u kojem plijen i predator zadržavaju konstantan broj jedinki ali i stabilna ili nestabilna oscilatorna stanja.

4.2. Ekosustav sa tri člana (NPZ)

Oznake i njihovo značenje koje je uvriježeno u ekološkom modeliranju akvatičkih sredina su: N – nutrijenti ; P – fitoplankton ; Z – zooplankton. Predpostavlja se logistički tip jednačbe sa kojom se opisuje populacijska dinamika fitoplanktona (P), koja sadrži i efekt samozasjenjivanja (jednačba 2.1).

Ukoliko se dodaje varijabla Z potrebno je uvesti i odgovarajuću jednačbu:

$$\frac{dP}{dt} = rP \left(1 - \frac{P}{K} \right) - \alpha_h PZ \quad (4.4)$$

$$\frac{dZ}{dt} = \alpha_h PZ - \delta_h Z \quad (4.5)$$

Ove jednadžbe su jednadžbe prethodno prezentiranog predator – plijen modela u kojem je plijen opisan sa logističkom a predator sa linearnom varijacijom. Ovakvim modelom moguće je postizanje dva ravnotežna-stacionirana stanja. Jedno je $Z = 0$ i $P = K$ odnosno fitoplankton na maksimumu. Drugi nije trivijalan i postiže se pri vrijednostima:

$$(P, Z) = \left(\frac{\delta_h}{\alpha_h}, \frac{r}{\alpha_h} \left(1 - \frac{\delta_h}{\alpha_h K} \right) \right).$$

Ukoliko se gornji sustav proširi za još jednu varijablu, primjerice karnivore (mesojede) koji se hrane isključivo zooplanktonom :

$$\frac{dP}{dt} = rP \left(1 - \frac{P}{K} \right) - \alpha_h PZ \quad (4.6)$$

$$\frac{dZ}{dt} = \alpha_h PZ - \delta_h Z - \alpha_c ZC \quad (4.7)$$

$$\frac{dC}{dt} = \alpha_c CZ - \delta_c C \quad (4.8)$$

Moguće je dobiti tri ravnotežna stanja, od kojih je jedno isto kao i u prethodnom primjeru ($P=K, Z=C=0$) i druga dva koja su jednaka primarnoj produkciji:

$$C = 0, P = \frac{\delta_h}{\alpha_h}, Z = \frac{r}{\alpha_h} \left(1 - \frac{\delta_h}{\alpha_h K} \right) \text{ sa nula karnivorima (mesojedima)} \quad (4.9)$$

$$C = \frac{\delta_h}{\alpha_h}, P = P^* = K \left(1 - \frac{\delta_h}{\alpha_h K} \right), C = \frac{1}{\delta_c} \left[rP^* \left(1 - \frac{P^*}{K} - \frac{\delta_h \delta_c}{\alpha_c} \right) \right] \quad (4.10)$$

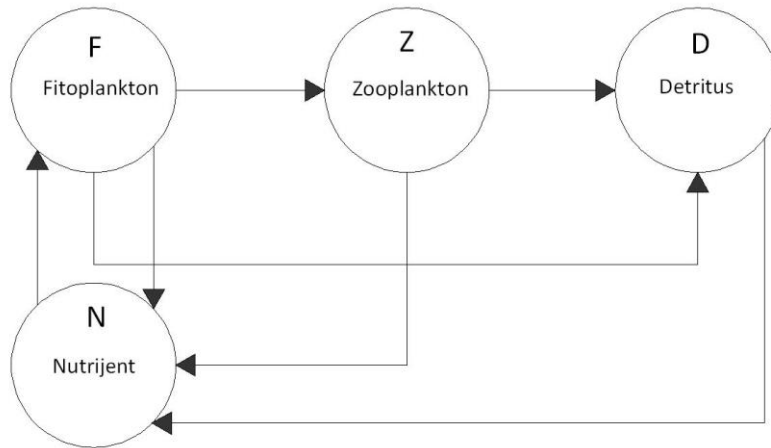
Alternativna navedenoj modelskoj strategiji sa pretpostavljenim linearnim funkcijama „odgovora“ u Z i C je pretpostavljanje samolimitirajuće relacije (Michaelis-Menten) zbog nekog kritičnog kriterija (prenapučenost, nedostatak hrane, itd.). Time jednadžbe za model sa dvije varijable P, Z poprimaju oblik:

$$\frac{dP}{dt} = rP \left(1 - \frac{P}{K} \right) - \frac{\alpha_h PZ}{P + P_0} \quad (4.11)$$

$$\frac{dZ}{dt} = \frac{\alpha_h PZ}{P + P_0} - \delta_h Z \quad (4.12)$$

Ekosustav sa četiri člana (NPZD)

Uvodi se nova oznake sa značenjem: D – detritus. Dijagram kojim se definiraju interakcijske veze unutar prehrambenog lanca dane su na slici 4.1.



Slika 4.1 – tok nutrijenata u NPZD modelu

Strelice pokazuju procese koji se opisuju sa članovima na desnoj strani jednadžbi procesa. U slučaju NPZD modela postoje 4 varijable odnosno 4 jednadžbe procesa. Kako se sa slike 4.1 može vidjeti, zooplankton će dobivati na masi hraneći se sa fitoplanktonom i konzumacijom detritusa a gubiti će masu kroz metaboličku aktivnost i odumiranje a ta masa se dalje pronosi ili kao nutrijent ili kao detritus. Fitoplankton se razvija kroz apsorpciju nutrijenata i kroz proces fotosinteze, a gubi masu kroz respiraciju do nutrijenata, kroz odumiranje do detritusa i kroz izloženost kao plijen prema zooplanktonu. Jedina strelica koja je još ostala neobjašnjena je remineralizacija od detritusa do nutrijenata. Obzirom da taj biokemijski proces može biti vrlo kompleksan, potrebno ga je pojednostavljeno interpretirati u jednadžbama modela. Primjerice NPZD model sadrži sljedeće jednadžbe:

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{N}{e+N} \frac{aP}{b+cP} + \frac{\beta\lambda P^2 Z}{\mu^2 + P^2} + \gamma dZ^2 + \phi D + k(N_0 - N) \quad (4.13)$$

$$\frac{dP}{dt} = \frac{N}{e+N} \frac{aP}{b+cP} - rP - \frac{\lambda P^2 Z}{\mu^2 + P^2} + (s+k)P \quad (4.14)$$

$$\frac{dZ}{dt} = \frac{\alpha\lambda P^2 Z}{\mu^2 + P^2} - dZ^2 \quad (4.15)$$

$$\frac{dD}{dt} = rP + \frac{(1-\alpha-\beta)\lambda P^2 Z}{\mu^2 + P^2} - (\phi + \psi + k)D \quad (4.16)$$

Prvi članovi sa desne strane jednadžbi procesa za varijable N i P predstavljaju konzumaciju za potrebe respiracije i rasta. Članovi imaju spomenutu Michaelis-Mentenovu formu sa dodatnim konstantama a, b, c u dijelu koji se odnosi na fitoplankton. Konstantama se

kvantificira utjecaj zamiranja intenziteta svijetlosti kroz „čisti“ morski stupac (b) i kroz morski stupac sa smanjenom prozirnošću uslijed povećane koncentracije fitoplanktona (c). Odnosom a/b definirana je maksimalna dnevna rata rasta. Funkcija $\lambda P^2/(\mu^2 - P^2)$ naziva se Holling tip III predatorska funkcija i uobičajena je u ekološkim modelima.

Iz gornjih izraza važno je uočiti da član $\frac{\lambda P^2 Z}{\mu^2 + P^2}$ predstavlja ratu smanjenja fitoplanktonske populacije uslijed prisustva zooplanktona kao predatora. Međutim, samo frakcija α sudjeluje u direktnoj izgradnji populacije zooplanktona, dok je frakcija β izlučena (metabolička aktivnost) od strane zooplanktona i trenutno regenerirana u jednadžbi procesa za nutrijente. Ostatak ($1 - \alpha - \beta$) predstavlja zooplanktonski fekaliju koji je regenerativan član u jednadžbi procesa za detritus. Član rP je generalni član odumiranja fitoplanktona kojim su uključeni faktori respiracije i prirodne smrtnosti.

Odumiranje zooplanktona u jednadžbi procesa opisano je kvadratnim zakonom dZ^2 . Dio odumrlog zooplanktona γdZ^2 (frakcija γ) nastaje metaboličke aktivnosti viših članova hranidbenog lanca pa u jednadžbu procesa za N dolazi sa pozitivnim predznakom (regeneriranje). Preostala frakcija ($1 - \gamma$) predstavlja hranu za više članove prehrambenog lanca koji u ovom NPZD modelu nisu obuhvaćeni sa posebnom jednadžbom procesa.

Konzumacija detritusa D od strane zooplanktona Z nije inkorporirana u prikazanom modelu. Ukoliko se želi matematički prezentirati i taj proces potrebno je uvođenje novog člana no ne samo u jednadžbama procesa za Z i D već i za N i P . Primjerice, uvođenjem novog kvadratnog člana u jednadžbu procesa za Z u formi ωD^2 prethodni sustav jednadžbi poprima sljedeći oblik:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{N}{e + N} \frac{aP}{b + cP} + \frac{\beta \lambda (P^2 + \omega D^2) Z}{\mu^2 + P^2 + \omega D^2} + \gamma dZ^2 + \phi D + k(N_0 - N) \quad (4.17)$$

$$\frac{dP}{dt} = \frac{N}{e + N} \frac{aP}{b + cP} - rP - \frac{\lambda P^2 Z}{\mu^2 + P^2 + \omega D^2} + (s + k)P \quad (4.18)$$

$$\frac{dZ}{dt} = \frac{\alpha \lambda (P^2 + \omega D^2) Z}{\mu^2 + P^2 + \omega D^2} - dZ^2 \quad (4.19)$$

$$\frac{dD}{dt} = rP + \frac{[(1 - \alpha - \beta)P^2 - (\alpha + \beta)\omega D^2] \lambda Z}{\mu^2 + P^2 + \omega D^2} - (\phi + \psi + k)D \quad (4.20)$$

Ovakvi modeli uobičajeno se upotrebljavaju za analizu jednog sloja u vertikalnom smjeru (po dubini). Dio detritusa koji potone na dno (ψD) može se tretirati kao ponor a remineralizacija je modelirana kao tok komponente D kojim se ostvaruje konverzija detritusa u nutrijente.

4.3. Poveznica s hidrodinamičkim modelom konvektivne disperzije

U prethodnim poglavljima prezentirana je metodologija koja može poslužiti kao osnov za uspostavu generičkog modela eko-sustava (naš primarni interes je akvatički eko sustav). Očigledno je da se sa sličnim matematičkim izrazima može simulirati i vremenska dinamika proizvoljno odabrane otopljene/suspendirane tvari ili čestica žive/odumrle materije odnosno ekološki procesi s interakcijskim vezama između pojedinih procesnih varijabli. U analizi odabrane procesne varijable mogu biti prostorno prijenosne kroz vezu (link) sa konvektivno-disperzivnom komponentom hidrodinamičkog modela ili fiksirane u prostoru, primjerice za dno.

U matematičkim izrazima s kojima se opisuju pojedini *proces* nalaze se i *procesne varijable*, *konstante*, *parametri prisile*, *pomoćne varijable*.

Procesne varijable su one koje daju najbolji uvid u stanje nekog eko-sustava a modelator ih treba sam odabrati na način da se praćenjem njihove dinamike mogu predvidjeti i buduća stanja promatranog sustava.

Konstante se koriste kao argumenti u matematičkim izrazima procesa i ne mijenjaju se u vremenu, no mogu biti prostorno varijabilne.

Parametri prisile koriste se kao argumenti u matematičkim izrazima kojima se opisuju procesi i mogu biti prostorno i vremenski varijabilni. Predstavljaju varijable kojima su obuhvaćeni vanjski utjecaji koji djeluju na eko-sustav poput temperature, solarne radijacije i vjetra.

Pomoćne varijable su također argumenti u formiranim i korištenim matematičkim-numeričkim izrazima procesa u eko-sustavu a neki puta se koriste samo za direktnu specifikaciju rezultata. Tipični primjeri pomoćnih varijabli su faktori solarne radijacije za dnevnu varijaciju ili relativna duljina dana.

Procesi daju matematički opis transformacije procesne varijable a što znači da su procesi korišteni kao argumenti u diferencijalnim jednadžbama koje se rješavaju modelom u svrhu određivanja stanja procesne varijable.

Opis procesnih varijabli ekosustavu je formuliran putem sustava diferencijalnih jednadžbi s kojima se proračunava brzina promjene koncentracije svake procesne varijable i bazirana je na procesima koji se odvijaju unutar promatranog ekosustava.

U numeričkoj modelskoj implementaciji moguća je upotreba takozvanih COM objekata. Jednadžbe definirane od strane modelatora prvo se transformiraju u listu instrukcija kojima se omogućava da objekt evaluira sve definirane izraze. Za vrijeme numeričke analize model

kroz jedan vremenski korak integrira pronos procesne varijable na bazi rješenja modela hidrodinamike (konvektivna disperzija). Tada se početna ili nova koncentracija zajedno sa deklariranim koeficijentima i konstantama unosi u numerički "objekt" koji provodi evaluaciju svih definiranih izraza te ih integrira kroz jedan vremenski modelski korak. Potom se nova vrijednost koncentracije vraća u model hidrodinamike koji ostvaruje slijedeći vremenski korak.

U općem slučaju za svaku procesnu varijablu specificira se odgovarajuća diferencijalna jednačba kojom se obuhvaćaju procesi bitni za promjene koncentracije specificirane procesne varijable. Ukoliko pojedini proces obuhvaća više od jedne procesne varijable ili ukoliko postoje interakcijska djelovanja više procesnih varijabli, jednačbe su međusobno ovisne.

Procesi koji se interpretiraju putem matematičkih izraza koriste argumente poput brojeva, konstanti, sila prisile i procesnih varijabli a uvijek opisuju brzinu promjene. U tom kontekstu konstante su stacionarne dok sile prisile mogu imati i nestacionarni karakter.

$$P_c = \frac{dc}{dt} = \sum_{i=1}^n \text{proces}_i \quad (5.1)$$

gdje je: c koncentracija procesne varijable; n broj procesa koji je od značenja za pojedinu procesnu varijablu.

Sile prisile poput temperature mogu biti specificirane na više načina, kako konstante u prostoru i vremenu, konstantne samo u prostoru ili varijabilne u prostoru i vremenu. Za vrijeme provedbe numeričkih analiza sve informacije se mogu novelirati kroz spregu sa hidrodinamičkim modulom.

Dinamika pronosa procesnih varijabli izražava se transportnom konvektivno disperzivnom jednačbom, koja u nekonzervativnoj formi poprima oblik:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + \sum S_c + \sum P_c \quad (5.2)$$

gdje je S_c oznaka za ponore i izvore a P_c oznaka za analizirani proces.

D

MODELIRANJE VALNOG GENERIRANJA

1. Uvod

Općenito razvoj modeliranja valova može se podijeliti na tri ere, prvu eru – eru čisto empirijski temeljenih metoda, drugu eru – eru poluempirijskih spektralnih modela i treću, još uvijek aktualnu, eru numeričkog modeliranja. Početak prve ere označio je Stevenson, za kojeg bi se moglo reći da je prvi modelirao valove generirane vjetrom kada je definirao najvišu valnu visinu koja će se dostići tijekom oluje ovisno o duljini privjetrišta. Također postoji još nekoliko empirijskih formula korištenih prije 40-tih godina 20.-tog stoljeća.

Sverdrup i Munk (1946.) su napravili početni korak u realnijem modeliranju valova generiranih vjetrom ispitujući razvoj valova na temelju proučavanja energije, privjetrišta i trajanja puhanja vjetra, te uvođenjem pojma značajne valne visine. Bretschneider (1952., 1958.) je proširio njihova nastojanja dodatnim podacima i razvio općepoznatu SMB (Sverdrup, Munk i Bretschneider) metodu.

Druga era započela je uvođenjem spektralne analize u proučavanjem valova ranih 50-tih i formuliranjem Neumannovog spektra, Pierson i dr. 1955 razvijaju prognozu valova temeljenu na spektralnoj analizi, PNJ (Pierson, Neumann i James) metodu. Konačno, okvir za numeričko modeliranje valova generiranih vjetrom postavio je Hasselmann (1963.) kada je postavio zakon očuvanja energije valnog spektra koji je predstavljao bazu moguće točne teorije dinamike valnog spektra.

Donelan (1977.) je primijetio da na stanje mora utječe trenje vjetra na površinu te je povezo fiziku valova s naprezanjem vjetra na površini. Razvio je jednostavan model prognoze valova temeljen na konceptu lokalne ravnoteže količine gibanja, a ne na ravnoteži energije. Prvi je uveo u analizu i kut otklona između smjera puhanja vjetra i smjera propagacije valova.

Proces generiranja, disipacije i međudjelovanja valova u dubokoj vodi prikazan je kroz tri generacije formulacije problema ovisno o stupnju parametrizacije procesa.

Schwab (1984.) je unaprijedio dotadašnji numerički okvir kako bi formulirao poluempirijski parametarski model, model prve generacije, u kojem je nelinearno međudjelovanje u potpunosti zanemareno. Predstavnici druge generacije modela su SHALWV (shallow-water wave) i DWAVE (deep-water wave) modeli (1981. i 1986.) koji su svojom strukturom vrlo slični WAM modelu – modelu treće generacije. Međusobno se razlikuju u tome što DWAVE ne uključuje trenje s dnom. Ono što ova dva modela opisuje kao modele druge, a ne treće generacije je njihov pristup parametrizaciji nelinearnog međudjelovanja koji je strogo ovisan o unaprijed definiranom spektralnom obliku.

Prema velikoj studiji usporedbe prve i druge generacije valnih modela objavljenoj 1985. od tima stručnjaka okupljenih pod imenom SWAMP group (Ocean wave modelling) u oba modela postojala su neka osnovna pojednostavljena kojima su modeli gubili na realnosti u ekstremnim uvjetima (osobito kod nagle promjene polja vjetra).

Spomenutom studijom započela je treća era, era numeričkog modeliranja koju je označio razvoj treće generacije valnih modela u kojima je četverostruko međudjelovanje valova izraženo eksplicitno. Prototip modela treće generacije je WAM model generiranja oceanskih valova WAMDI grupe (1988.).

2. Formulacija problema valnog generiranja

U ovom poglavlju prikazana je općenito prihvaćena formulacija problema modeliranja generiranja gravitacionih vjetrovnih valova.

Za opis valnog modela u proizvoljnom slučaju, pretpostavlja se izdizanje površine kao zbroj velikog broja nezavisnih linearnih valnih komponenti. Time se valna prognoza temelji na prognozi svake od tih nezavisnih komponenti zasebno, odnosno energije spektra $E(f, \delta)$ svake komponente, pri čemu je f valna frekvencija i δ proizvoljni smjer svake pojedine komponente. Budući je energija spektra promjenjiva u vremenu, t i prostoru, (x,y) , korektan je zapis u obliku $E(f, \delta) = E(f, \delta; x, y, t)$.

Razvoj energije svake valne komponente (f, δ) može se odrediti integracijom jednadžbe razvoja energije uslijed napredovanja brzinom grupe u smjeru vala:

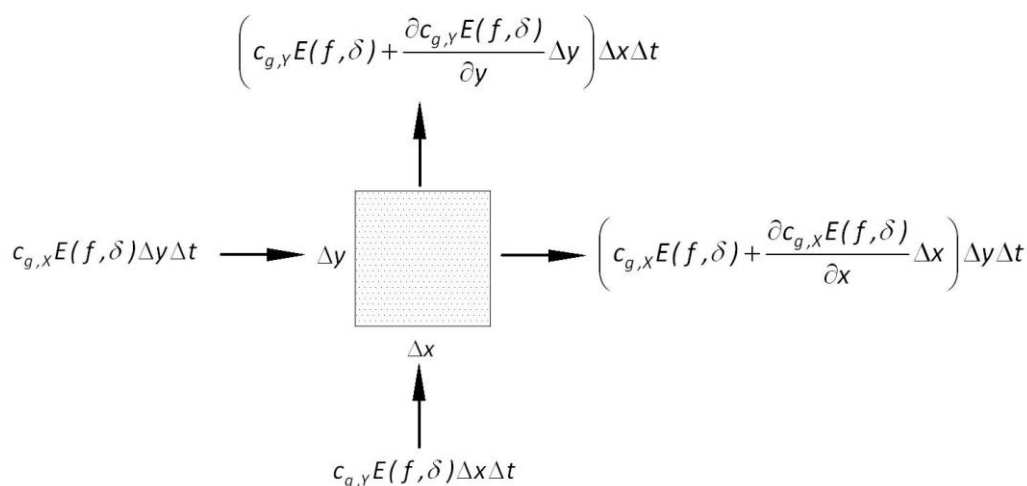
$$\frac{dE(f, \delta; x, y, t)}{dt} = S(f, \delta; x, y, t) \quad (2.1)$$

gdje je lijeva strana jednadžbe brzina promjene energije valnog spektra, a desna strana jednadžbe predstavlja superpoziciju funkcija koje opisuju različite fizikalne fenomene obuhvaćene analizom, u obliku $S = S_W + S_{NL} + S_{DS} + S_B + S_S$ (predstavlja izvore i ponore). Pritom S_W predstavlja snagu koja u sustav dolazi od vjetra, S_{NL} opisuje nelinearni prijenos energije (snage) između samih valova (ovisno o plitkovodnom ili dubokovodnom području), S_{DS} disipaciju energije (snage) uslijed površinskog loma valova, S_B disipaciju energije (snage) uslijed trenja s dnom i S_S disipaciju valne energije (snage) uslijed loma valova uzrokovanog promjenom dubine.

Širenje valova, opisano lijevom stranom jednadžbe (2.1), uzima u obzir poznate utjecaje refrakcije, plićine, difrakcije i refleksije koji dominiraju promjenom valnog polja. Konceptualno gledano, izraz (2.1) predstavlja Lagrangeov pristup. Prelaskom na Eulerovu

formulaciju spektra se ne određuje samo u jednoj predikcijskoj točki nego u velikom broju točaka simultano s jednadžbom energetske ravnoteže postavljenom za svaku od tih točaka. Pri određivanju bilance energije u točkama prema Eulerovom pristupu, uspostavlja se proračunska mreža s reprezentativnim ćelijama veličine Δx u x smjeru i Δy u y smjeru. Odgovarajuća jednadžba bilance energije za promatranu prostorno fiksnu ćeliju glasi:

*promjena energije u fiksnoj ćeliji u jedinici vremena =
sumarni tok energije kroz ćeliju + lokalno generirana energija na području ćelije u jedinici vremena*



Slika 2.1

Razlika energije na kraju i na početku vremenskog intervala Δt , može se pisati u obliku:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(f, \delta; x, y, t)}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta t &= \\ &= \left(E(f, \delta; x, y, t) \Delta x \Delta y + \frac{\partial E(f, \delta; x, y, t)}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta t \right) - E(f, \delta; x, y, t) \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (2.2)$$

Ukupni unos energije u ćeliju tijekom intervala Δt u x smjeru odgovara ulasku energije s lijeve strane ćelije (s brzinom $c_{g,x} = c \cos \delta$ po širini Δy) umanjeno za veličinu energije koja izlazi iz ćelije na desnoj strani (s veličinom koja se razvila na duljini Δx):

$$\begin{aligned} - \frac{\partial c_{g,x} E(f, \delta; x, y, t)}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta t &= \\ = c_{g,x} E(f, \delta; x, y, t) \Delta y \Delta t - \left(c_{g,x} E(f, \delta; x, y, t) + \frac{\partial c_{g,x} E(f, \delta; x, y, t)}{\partial x} \Delta x \right) \Delta y \Delta t \end{aligned} \quad (2.3)$$

Isto tako, unos energije u y -smjeru može se pisati u obliku:

$$\begin{aligned}
& -\frac{\partial c_{g,x} E(f, \delta; x, y, t)}{\partial y} \Delta x \Delta y \Delta t = \\
& = c_{g,y} E(f, \delta; x, y, t) \Delta x \Delta t - \left(c_{g,y} E(f, \delta; x, y, t) + \frac{\partial c_{g,y} E(f, \delta; x, y, t)}{\partial y} \Delta y \right) \Delta x \Delta t \quad (2.4)
\end{aligned}$$

gdje je: $c_{g,x} = dx/dt$, $c_{g,y} = dy/dt$ komponente brzine grupe valova u x i y smjeru pri konstantnoj frekvenciji i smjeru u dubokovodnom području.

Lokalno generirana energija na području ćelije s površinom $\Delta x \Delta y$ tijekom vremenskog intervala Δt je $S(f, \delta; x, y, t) \Delta x \Delta y \Delta t$ a članom izvora/ponora $S(f, \delta; x, y, t)$ obuhvaćaju se svi efekti generiranja valova vjetrom, nelinearnog međudjelovanja valova te disipacije valne energije u jedinici vremena i prostora.

Prema tome ukupna promjena energije za ćeliju $\Delta x \Delta y$ u vremenu Δt definirana je izrazom:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial E(f, \delta; x, y, t)}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta t + \frac{\partial c_{g,x} E(f, \delta; x, y, t)}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta t + \frac{\partial c_{g,y} E(f, \delta; x, y, t)}{\partial y} \Delta x \Delta y \Delta t = \\
& = S(f, \delta; x, y, t) \Delta x \Delta y \Delta t \quad (2.5)
\end{aligned}$$

Dijeljenjem izraza 2.5 sa $\Delta x \Delta y \Delta t$ dobiva se Eulerova jednadžba očuvanja spektralne energije za svaku valnu komponentu i svaku ćeliju u svakom trenutku:

$$\frac{\partial E(f, \delta; x, y, t)}{\partial t} + \frac{\partial c_{g,x} E(f, \delta; x, y, t)}{\partial x} + \frac{\partial c_{g,y} E(f, \delta; x, y, t)}{\partial y} = S(f, \delta; x, y, t) \quad (2.6)$$

U dubokovodnom području brzina širenja vala ne ovisi o x i y, pa slijedi:

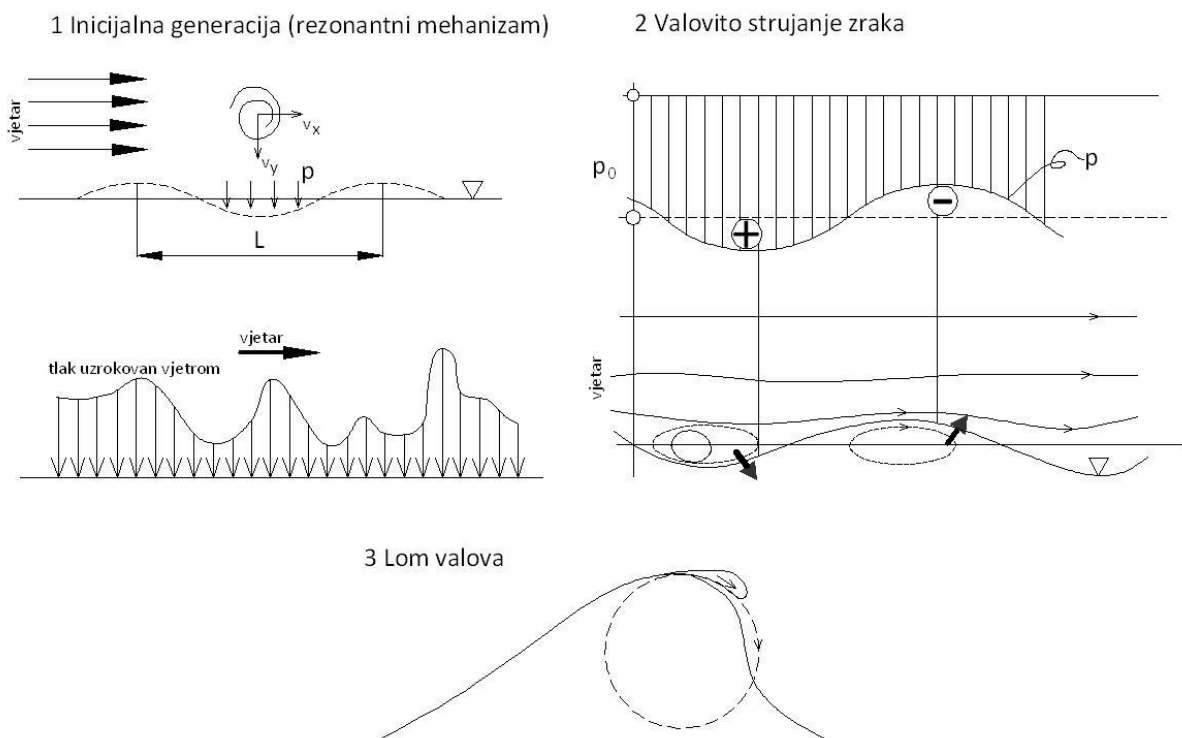
$$\frac{\partial E(f, \delta; x, y, t)}{\partial t} + c_{g,x} \frac{\partial E(f, \delta; x, y, t)}{\partial x} + c_{g,y} \frac{\partial E(f, \delta; x, y, t)}{\partial y} = S(f, \delta; x, y, t) \quad (2.7)$$

Eulerov pristup modeliranju valova zapravo se svodi na jednu jednadžbu očuvanja energije 2.7. Integracija ove jednadžbe u prostoru i vremenu uključuje veliki broj točaka u prostoru i vremenu, te veliki broj valnih komponenti a jednadžbu je potrebno riješiti za svaku kombinaciju tih točaka i komponenti.

Mjerenja iz 1970-ih i teoretski radovi koji opisuju mehanizam generiranja valove unutar graničnog sloja rezultirali su parametrizacijom funkcije izvora valne energije od djelovanja vjetra. Zajedno s prikazom velikog broja komponenti valnog spektra parametrizacija ima potencijal da dovede do željenog opisa prijenosa energije s vjetra na valove u približno realnim odnosima.

2.1. Mehanizam generiranja valova vjetrom

Općenito, vjetrovni valovi generiraju se kroz tri faze. U trenutku kada vjetar počinje puhati nad morem, kontaktna površina je ravna i mirna. U prvoj fazi, fazi početne (inicijalne) generacije javlja se rezonantni mehanizam kad turbulentno strujanje zraka inducira pulsirajući tlak na morsku površinu. Uslijed toga nastaju valovi na površini mora iste frekvencije kakvu imaju i pulzacije tlaka, pa nabori zbog rezonancije i dalje rastu (slika 2.1). Zatim slijedi druga faza, faza valovitog strujanja zraka nad valnim profilom bez odvajanja strujnice. Energija vjetra se na valove prenosi preko vrtloga zraka u dolu vala i preko rezultirajućeg polja tlaka koje uzrokuje porast valne visine (slika 2.2). U posljednjoj fazi dolazi do lomljenja valova, kad se valovi malih valnih dužina lome na grebenima dugih valova. U zadnjoj (trećoj) fazi nastaju i najveći valovi. Kratki val koji se slomi na dugom valu dodaje impuls od svoje prebačene mase kinetičkoj energiji orbitalnog gibanja vodnih čestica dugog vala. Povećanjem energije dugog vala raste mu i valna visina, pa se tako valna energija prenosi s kratkih na duge valove (slika 2.2).



Slika 2.2 Osnovne faze mehanizma generiranja vjetrovnih valova (1-Inicijalna generacija, 2-Valovito strujanje zraka, 3-Lom valova)

Razumijevanje razvoja vjetrovnih valova vrlo je zahtjevan zadatak. S teoretskog stajališta potrebno je uočiti da se radi o izuzetno teškom problemu koji uključuje modeliranje turbulentnog strujanja zraka iznad površine mora koja se mijenja u prostoru i vremenu.

2.1.1. Teorije prijenosa energije vjetra na valove - Milesova teorija

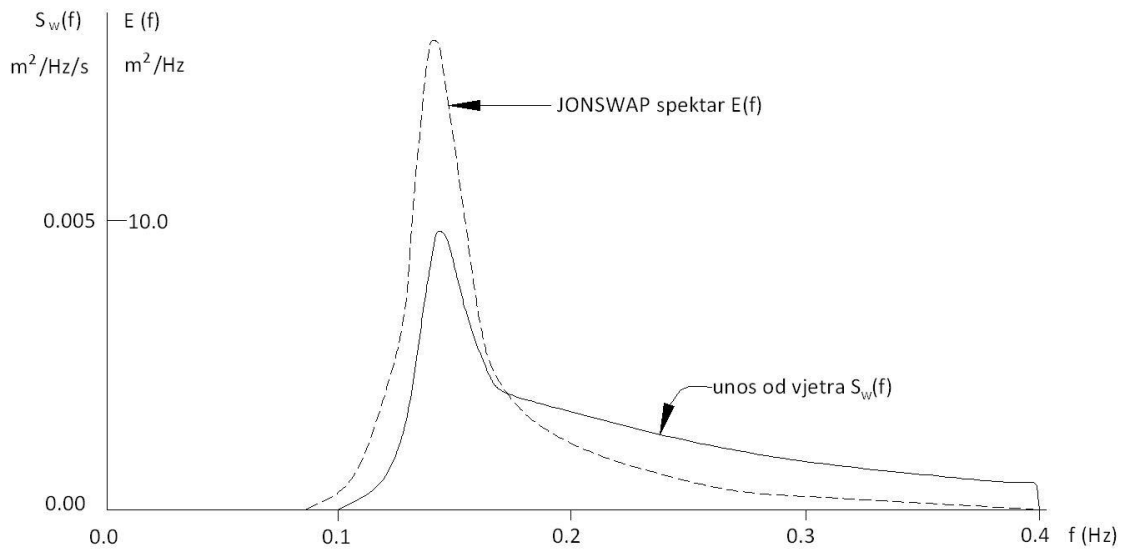
U toku generiranja valova, profil brzina vjetra iznad površine mora se mijenjati. Brzina vjetra na bregovima nastalih valova je veća, dok je u dolovima manja. To rezultira povećanjem pritiska na brijegu valova, a smanjenjem u dolu te dolazi do porasta valova. Na određenom mjestu vertikalne raspodjele brzine, brzina će biti jednaka nuli. Udaljenost od mirne površine mora do te točke je visina kritičnog sloja unutar kojeg će brzina vjetra biti reverzibilna, odnosno smjer kretanja čestica vjetra će biti suprotan u odnosu na smjer širenja vala. Kao posljedica toga stvara se vrtlog (eng: vortex koji ekstrahira energiju iz vjetra i predaje ju valnom polju). Phillips je razmatrao rezonanciju kontaktne površine i turbulentnog strujanja zraka, dok je Miles razmatrao rezonanciju između valova uzrokovanih poljem tlaka iznad slobodne površine. Ova dva mehanizma mogu se nadopunjavati. U prvoj fazi generiranja valova dominira rezonantno valno generiranje s linearnim porastom energije prema Philipsovoj teoriji, dok u kasnijim fazama međudjelovanje vjetra i valova generira eksponencijalni porast energije s fizikom procesa objašnjenom u Milesovoj teoriji. Osnovni razlog za kontroverze u Milesovoj teoriji bilo je pojednostavljenje stvarnog problema kroz usvajanje pretpostavki o linearnosti procesa te kvazilaminarnom strujanju zraka (bezviskozno i bez utjecaja turbulencije izvan graničnog sloja). Provedeni eksperimenti u ranijem periodu osmatranja valnog generiranja (Dobson, 1971.) pokazali su da je prijenos energije sa vjetra na valove reda veličine veće od pretpostavljenog prema Milesovoj teoriji. S druge strane, novija mjerenja (Hasselmann i Bosenberg, 1991.) pokazala su slaganje reda veličine s Milesovom teorijom, iako teorija i dalje predviđa manji prijenos energije od mjerenih vrijednosti. Razlika Milesove teorije i mjerenja je bila posebno izražena kod niskofrekventnih valova s faznom brzinom približno jednakom brzini vjetra na visini 10 m iznad površine. U toku generiranja valova, profil brzina vjetra iznad površine mora se mijenjati. Brzina vjetra na bregovima nastalih valova bit će veća, a u dolovima manja što će rezultirati povećanjem pritiska na dolu valova i smanjenjem na brijegu. Time je vremenski razvoj valnih visina brz i prati eksponencijalni zakon prirasta. Na određenom mjestu u vertikalnom profilu brzine vjetra, brzina će biti jednaka nuli. Udaljenost od mirne površine mora do te točke je tzv. visina kritičnog sloja unutar kojeg su brzine vjetra suprotnog smjera od smjera propagacije valova. Posljedica toga je formiranje sloja u kome se ekstrahira energija vjetra i predaje postojećem valnom polju. Belcher i Hunt (1993.) otkrili su dva sloja u strujanju zraka nad valovima. Turbulencija u sloju bližem površini (eng: inner region) u ravnoteži je s lokalnim gradijentom brzine. Iznad tog sloja formira se drugi sloj (eng: outer region) u kojem se turbulencija nije uravnotežena. Kretanje valova pri manjim brzinama vjetra je sporije od same brzine vjetra. S druge strane, povećanje brzine vjetra osim povećanja valnih visina uzrokuje i povećanje valnih duljina odnosno brzina. Potrebno je napomenuti da se s modelima primarno želi istražiti valna fenomenologija vezana uz „najviše“ i „najduže“ valove odnosno one s brzinom istog reda veličine brzini vjetra. Nažalost, za njih prethodno navedena teorija ne vrijedi. Daljnje unapređenje teorije valnog generiranja dao je Mastenbroek (1996.) kroz model turbulencije zraka prema teoriji drugog reda.

2.1.2. Modelska implementacija

Član izvora energije S_W (2.1) definiran je rezultatima istraživanja u kojima se pokazalo da intenzitet valnog generiranja ovisi o vremenu proteklom od inicijalizacije vala prema zakonu:

$$S_W(f, \delta) = \gamma E(f, \delta) \omega \quad (2.8)$$

gdje je: $f = \omega / 2\pi$ valna frekvencija, γ intenzitet valnog generiranja.



Slika 2.2 Utjecaj člana izvora S_W (vjetra) u formiranju JONSWAP spektra u dubokom (definirano pomoću formulacije inicijalne generacije prema Cavaleri i Malanotte-Rizzoli, 1981., i modelom Miles-a, 1957., za $H_{m0}=3,5\text{m}$, $T_p=7\text{s}$ i $U_{10}=20\text{m/s}$)

Intenzitet valnog generiranja definiran je izrazom predloženim od Janssena:

$$\gamma = \omega \frac{\rho_z}{\rho_v} \left(\frac{1,2}{\kappa^2} \mu \ln^4 \mu \right) \left[\frac{u_*}{c} \cos(\delta - \delta_w) \right]^2 \quad (2.9)$$

gdje je: ρ_z , ρ_v gustoća zraka i vode, κ Karmanova konstanta, δ_w smjer vjetra, δ smjer vala, u_* brzinsko trenje od vjetra, $c = \omega/k$ fazna brzina vala, μ bezdimenzionalna kritična visina vala definirana izrazom $\mu = k z_0 \exp(\kappa/m)$, z_0 hrapavost morske površine inducirana djelovanjem vjetra definiran odnosom:

$$z_0 = \frac{Z_{\text{CHARNOCK}} u_*^2}{g} \left(1 - \frac{\tau_v}{\rho_z u_*^2} \right)^{-1/2} \quad (2.10)$$

gdje je: τ_w naprezanje na morskoj površini inducirano djelovanjem vjetra, Z_{CHARNOCK} modelska konstanta.

2.2. Nelinearno međudjelovanje valova

Nelinearno valno međudjelovanje najlakše je opisati ako se zamisli veliki bazen konstantne dubine u kojem se iz dva različita ugla generiraju valovi različitih frekvencija i smjerova. Na taj način formira se sustav koji ima svoj smjer, duljinu i brzinu, pa samim time i svoj valni broj k . Ako na ta dva vala naiđe treći val iste duljine, brzine i smjera kao rezultatni od prethodna dva doći će do njihovog međudjelovanja koje se naziva triada (eng: triad wave-wave interaction). Pri tome dolazi do preraspodjele energije između valova, ali ukupna energija sve tri komponente u svakoj točki ostaje ista. Opisana situacija javlja se samo u plitkom području.

U dubokom može doći do međudjelovanja između dva para valova ako se poklope valni brojevi i frekvencije njihovih rezultanti. Tada dolazi do prijenosa energije sa jednog para na drugi i to međudjelovanje zovemo quadruplet (eng: quadruplet wave-wave interaction). Treba naglasiti da se uslijed quadrupleta spektralna energija samo preraspodjeljuje, ne gubi se niti u sustav ulazi nova energija. Osnovna jednačba koja opisuje ovaj proces je Boltzmanov integral (Hasselmann, 1962.; Zakharov, 1968.).

Hasselmann je ustanovio da skup od 4 vala (quadruplet) razmjenjuje energiju kada su zadovoljeni sljedeći uvjeti rezonancije $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4$ i $\omega_1 + \omega_2 = \omega_3 + \omega_4$ pri čemu je ω_1 kutna frekvencija, a \mathbf{k}_i vektor valnog broja. Linearna disperzija dana je izrazom $\omega^2 = gk \tanh(kh)$ što u dubokovodnom području prelazi u oblik $\omega^2 = gk$, pri čemu je g oznaka za gravitaciono ubrzanje a h dubina.

Član S_{NL} koji u numeričkim modelima opisuje prijenos energije između valova egzaktno je određen Boltzmannovim izrazom (Hasselmann, 1962.)

$$S_{NL-4}(\mathbf{k}_4) = \int_{dk_2} \int_{dk_2} T_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4) E(\mathbf{k}_1) E(\mathbf{k}_2) E(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4) dk_1 dk_2 - E(\mathbf{k}_4) \int_{dk_2} \int_{dk_2} T_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_4) E(\mathbf{k}_1) E(\mathbf{k}_2) dk_1 dk_2 \quad (2.11)$$

gdje su T_1 i T_2 koeficijenti prijenosa izraženi složenim funkcijama ovisnim o vektorima valnih brojeva. Pri tome u gornjem izrazu prvi integral predstavlja „pasivni“ dio međudjelovanja (nezavisan o gustoći energije $E(\mathbf{k}_4)$), dok drugi integral predstavlja „aktivni“ dio međudjelovanja. Energija valne komponente \mathbf{k}_4 ovisno o odnosu aktivnog i pasivnog dijela raste ili pada. Prema tome val opisan valnim brojem \mathbf{k}_4 ekstrahira energiju iz sustava kroz pasivni dio, a predaje ga sustavu kroz aktivni dio.

Od kada je izveden Boltzmannov integral napravljen je veliki napredak u razumijevanju uloge četverostrukog valnog međudjelovanja u razvoju vjetrovnih valova.

Boltzmannov integral originalno je izveden za duboku vodu uz pretpostavku homogenog i stacionarnog stanja mora i uz točno definiranu rezonanciju između spektralnih komponenti. Ovaj osnovni koncept proširen je uključivanjem utjecaja plitkog područja i pretpostavkom ravnog dna. Valjanost Boltzmannovog integrala može se provjeriti samo korištenjem numeričke simulacije nelinearnog razvoja slobodnih površinskih gravitacijskih valova. U tijeku je niz istraživanja koja bi trebala potvrditi valjanost Boltzmannovog integrala za primjenu neovisno o obliku spektra i za plitku vodu s nagnutim dnom. Razvijene su razne egzaktne numeričke tehnike za izračun Boltzmannovog integrala s velikom točnosti.

Mnogi eksperimenti, započevši s JONSWAP mjerenjima, potvrdili su ulogu nelinearnog četverostrukog međudjelovanja na razvoj valova u uvjetima ograničenog privjetrišta. Time se razjasnio i mehanizam spuštanja spektralnog vrha, stabilizacije spektra i direkcijske distribuciju spektra u ovisnosti o frekvenciji. Interesantna je i uloga tog međudjelovanja u plitkovodnom području te njegov utjecaj u odnosu na druge fizikalne procese kao što su trostruko valno međudjelovanje (triada) i lom valova uslijed promjene dubine.

2.3. Spektralna disipacija u dubokovodnom području

Disipacija energije u dubokovodnom području najslabije je shvaćen dio fizike potrebne za modeliranje valova. Postoji opći dogovor da je najveći dio te disipacije posljedica loma valova, ali fizika procesa loma, posebno kod spektralnih valova, nije potpuno razjašnjena. Ostaju otvorena pitanja o tome koliko se energije gubi površinskim lomom valova u kojem djelu spektra te što uzrokuje lom valova i prestanak loma. Kao drugi bitan gubitak energije pretpostavlja se disipacija uslijed međudjelovanja valova i turbulencije. Postoji i niz drugih mehanizama uslijed kojih dolazi do gubitka energije u uvjetima međudjelovanja vjetra i valova. Jednostavno, može se reći da je fizika spektralne disipacije još uvijek nerazlučena, a teoretska i eksperimentalna istraživanja u ovom području su rijetka s često kontradiktornim rezultatima. U nastavku se komentira samo uobičajeno dominantni izvor disipacije energije: disipacija uslijed površinskog loma valova.

2.3.1. Disipacija uslijed loma valova

Članom S_{DS} u jednadžbi (2.1) obuhvaća se disipacijski proces izazvan površinskim lomovima valova (engl.: *whitcapping*) Ovdje je prikazan oblik koji se koristi u trećoj generaciji valnih modela. Formulacija člana S_{DS} izražena je sljedećom jednadžbom:

$$S_{SD}(f, \delta) = -C_{dis} \left(\frac{\alpha}{\alpha_{PM}} \right)^m \left((1 - \xi) \left(\frac{k}{k} \right)^2 \right) \overline{\omega} E(f, \delta) \quad (2.12)$$

gdje je: C_{dis} , ξ , m empirijske konstante; α strmost valnog polja; α_{PM} strmost valnog polja u Pierson-Moskowitz valnom spektru; $\bar{\omega}$ srednja kutna frekvencija; \bar{k} srednji valni broj.

Matematički najrazvijeniji i najčešće korišteni disipacijski model je Hasselmannov model (1974.). Ovaj model spada u grupu modela koji analiziraju problem nakon loma valova. Prema tom modelu, jednom kada se uspostavi slučajna raspodjela površinskog loma valova, razlog samog loma vala nije više bitan. Rezultat takvog shvaćanja je linearna disipacija.

2.4. Nelinearno međudjelovanje u plitkovodnom području

Analogno kao i kod uvjeta rezonancije za četiri valne komponente, uvjet rezonancije za tri valne komponente zahtjeva da zbroj frekvencija i vektora valnih brojeva dva slobodna vala bude jednak frekvenciji i vektoru valnog broja trećeg vala $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3$ i $\omega_1 + \omega_2 = \omega_3$.

Ovaj zahtjev za rezonancijom nije u skladu s disperzijskim izrazom linearne valne teorije u dubokovodnom području, tako da se ovaj problem javlja samo u plitkovodnom području. U prijelaznom području ovaj uvjet može biti približno ispunjen, pa se javlja približno rezonantno stanje.

Povijesno gledano modeli u plitkom temelje se na klasičnoj Boussinesqovoj jednadžbi i Korteg i de Vries teoriji konstantne dubine s kraja 19. stoljeća, proširenoj na promjenjivu dubinu (Peregrine, 1967.). U toj teoriji pretpostavlja se Stokesov (ili Ursellov) broj reda $O(1)$, tj. nelinearnost i disperzija su pretpostavljene kao istog reda. Originalna Boussinesqova aproksimacija je prihvatljiva za slučaj slabe disperzije i nelinearnosti, što ograničava njenu primjenu na jako plitko područje. Novijim napretkom obuhvaćena je puna nelinearnost (Wei i sur., 1995.) i utjecaj disperzije višeg reda (Madsen i sur., 2003.), čime je podržana uspostava modela za prijelazno područje.

Hasselmannova teorija međudjelovanja četiri rezonantna vala, koja predstavlja temelj većine dubokovodnih prognostičkih modela, ograničena je na duboko i prijelazno područje gdje je Stokesov broj ≤ 1 (Zakharov, 1999.). Isto tako, poznato je da međudjelovanje tri vala (triada) nije rezonantno u dubokom i prijelaznom području. No, uslijed napredovanja površinskih valova iz dubokog prema plitkom, triadno djelovanje preuzima dominantnu ulogu u dinamici promatranog problema.

Ovaj prijelaz sa četverostrukog na trostruko međudjelovanje je rezultat promjene u disperzijskoj jednadžbi iz disperzivnog dubokovodnog režima koji ne podržava triadu (Phillips, 1960.) do nedisperzivnog plitkovodnog režima u kojem sve valne komponente napreduju istom brzinom. Iako je triada egzaktno rezonantna samo za monodirekcijske

valove u plitkom, međudjelovanja blizu rezonancije isto tako mogu imati značajnu ulogu u razvoju valova kroz plitkovodno priobalno područje.

2.4.1. Disipacija na dnu

Jednadžba energetske ravnoteže vala eksplicitno sadrži član za disipaciju uslijed površinskog loma u dubokovodnom području. Kako valovi stižu u plitkovodno područje, počinju „osjećati“ dno.

Trenje s dnom je složeni proces u relativno tankom (u usporedbi s dubinom) i pretežito turbulentnom sloju uz dno. Ono nastaje uslijed gibanja vodnih čestica uzrokovano površinskim valovima. U osnovi to je prijenos energije s orbitalnog gibanja čestica neposredno iznad tog sloja na turbulentna gibanja u samom sloju. Stoga taj prijenos ovisi o samom valnom polju i o karakteristikama dna.

Razvijena su dva tipa modela za rješavanje ovog problema. U viskozno-vrtložnom modelu disipativni karakter turbulentnog sloja definiran je u ovisnosti o parametrima dna (Madsen i sur., 1988.; Weber, 1991.). S druge strane, jednostavna, ali često korištena alternativa navedenim modelima je Hasselmannov pristup (Hasselmann i sur., 1973.) kojim se definiraju osnovni parametri neovisno o konkretnim svojstvima u pojedinom problemu. Ovaj pristup se primjenjuje u većini operativnih modela i daje razumnu točnost.

3. Model valnog generiranja

U nastavku opisanim modelom omogućava se simulacija generiranja i zamiranja gravitacijskih vjetrovnih valova i valova mrtvog mora u području otvorenog mora i priobalja.

Osnovna jednadžba analiziranog procesa je jednadžba očuvanja valnog djelovanja $N(x,y,\omega,\delta)=E(x,y,\omega,\delta)/\omega$, definiranog omjerom gustoće energije valnog spektra E i kutne frekvencije ω :

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \nabla \cdot (cN) = \frac{(I+P)}{\omega} \quad (3.1)$$

gdje je: t vrijeme; x,y kartezijeve koordinate; $c=(c_x,c_y,c_\omega,c_\delta)$ brzina valne grupe u 4-dimenzionalnoj (x,y,ω,δ) domeni ($c_x = dx/dt$, $c_y = dy/dt$, $c_\omega = d\omega/dt$, $c_\delta = d\delta/dt$); I, P članovi izvora i ponora, ∇ diferencijalni operator u 4-dimenzionalnoj (x,y,ω,δ) domeni; δ smjer propagacije vala; ω kutna frekvencija izražena jednadžbom linearne valne disperzije $\omega = \sqrt{gk \tanh(kd)}$; $k = 2\pi/L$ valni broj, L duljina vala, d dubina vode.

Član izvora I definiran je jednažbama 2.8, 2.9. i 2.10. Članom ponora P obuhvaća se disipacijski proces izazvan površinskim lomovima valova (eng: whitecapping) koji je u modelu inkorporiran temeljem jednažbe 2.12.

E

MODELIRANJE SUSTAVA POD TLAKOM

1. Uvod

Modelom sustava pod tlakom uobičajeno se rješavaju problemi vezani uz vodoopskrbu. Modelom se u osnovi proračunavaju vrijednosti varijabli primarnog interesa, protoci u cijevima sustava i tlakovi u čvorovima na koje su cijevi priključene. Osim cijevi, modelima se uobičajeno simulira i utjecaj otvorenosti pojedinih ventila i zatvarača u mreži te utjecaj stanja njihove otvorenosti na konačnu raspodjelu protoka i tlakova u sustavu. Isto tako, vodospreme, pumpe i turbine, kao važni elementi svakog realnog sustava vodoopskrbe, jednostavno se uključuju u odgovarajući čvor sustava. Za spomenute elemente sustava, korisnik modela u većoj ili manjoj mjeri definira njihova karakteristična stanja, dok samo model mora omogućavati detekciju eventualno unešenih „konflikata“, odnosno nelogičnosti.

Modelima se najčešće provode analize stacionarnog stanja u režimu maksimalne opterećenosti sustava. Osnovni uvjeti postavljaju se od strane projektanta, koji ponuđenim rješenjem treba osigurati dobavu zahtijevanih količina vode uz istovremeno zadovoljenje uvjeta postavljenih na minimalne/maksimalne dozvoljene tlakove. Mnogi dostupni modeli današnjice omogućavaju provedbu proračuna za kvazi-nestacionarni režim rada. Pod tim se misli na mogućnost proračuna niza sukcesivnih stanja vodovodnog sustava s uobičajenim vremenskim korakom od 1 sat. Time se realna i izrazito složena dinamika sustava aproksimira s nizom stacionarnih stanja koja variraju od sata do sata.

Pune analize sa širim obuhvatom nestacionarnosti i nejednolikosti strujanja, poput proračuna vodnog udara u dijelovima ili cijelom sustavu pod tlakom, uobičajeno se rješavaju van osnovnih modela vodovodnih sustava. Najsofisticiraniji modeli vodoopskrbnih sustava današnjice ipak omogućuju i proračun tranzijentnih stanja tlakova/protoka u osnovnoj modelskoj rutini, doduše samo u okviru jednodimenzionalnog opisa pojave.

Ukoliko se želi opisati lokalno polje strujanja u okvirima nestacionarnosti i nejednolikosti, u realnijoj 3D formulaciji, potrebna je primjena puno složenijih modela s inkorporiranim modelima turbulencije. O takvim modelima u ovom poglavlju neće biti riječ, te se u nastavku navode podaci relevantni samo za jednostavni model stacionarnog stanja.

2. Proračun vodovodnog sustava pod tlakom primjenom gradijentne metode

Opisuje se *gradijentna metoda* proračuna stacionarnog strujanja u vodoopskrbnom sustavu pod tlakom (Todini i Pilati; 1987). Simultano se rješavaju jednačbe kontinuiteta i Bernullijeve jednačbe za cjevovodni sustav pod tlakom, sačinjen od N veznih čvorova i NF čvorova s fiksnim vrijednostima (npr. vodosprema)

Odnos protoka u cijevi i razina energetske linije između dvije krajnje točke cijevi na međusobnoj udaljenosti L_{ij} (duljina cijevi) može se izraziti jednačbom:

$$E_i - E_j = \Delta E_{ij} = RQ_{ij}^N + mQ_{ij}^2 \quad (1a)$$

gdje je: E_i, E_j energetske razine u čvorovima na početku (i) i na kraju cijevi (j) kroz koju protiče protok Q_{ij} ; ΔE_{ij} = gubitak mehaničke energije (pad energetske linije) od čvora i do čvora j ; R koeficijent otpora za linijske gubitke; N = eksponent strujanja; m koeficijent otpora za lokalne gubitke.

Doprinos pumpe, kao izvor mehaničke energije, može se interpretirati i kao negativni gubitak energije temeljem sljedeće zakonitosti:

$$\Delta E_{ij} = -\omega^2 \left[H_0 - r(Q_{ij} / \omega)^n \right] \quad (1b)$$

gdje je: H_0 energetska razina prekida rada pumpe; ω relativna brzina; r, n koeficijenti radne linije pumpe.

Ukoliko se koristi Darcy - Weisbachov izraz za proračun gubitka energije, koeficijent otpora $R = \lambda(L/d)$ određuje se ovisno o Reynoldsovom broju Re . Za slučaj $Re < 2000$ koristi se izraz za laminarne otpore $\lambda = 64/Re$, dok se za slučaj $Re > 4000$ primjenjuje Swamee i Jain aproksimacija Colebrook-White jednačbi:

$$\lambda = \frac{0,25}{\left[\ln \left(\frac{\varepsilon}{3,7d} + \frac{5,74}{Re^{0,9}} \right) \right]^2} \quad (2a)$$

gdje je ε apsolutna hrapavost; d promjer cijevi.

U prelaznom području $2000 < Re < 4000$ primjenjuje se kupna interpolacija iz Moodyjevog dijagrama:

$$y_0 = \frac{Re}{2000} \quad (2b)$$

$$y_1 = \frac{\varepsilon}{3,7d} + \frac{5,74}{Re^{0,9}} \quad (2c)$$

$$y_2 = -0,86859 \ln\left(\frac{\varepsilon}{3,7d} + \frac{5,74}{4000^{0,9}}\right) \quad (2d)$$

$$y_3 = y_2^{-2} \left(2 - \frac{0,00514215}{y_1 y_2}\right) \quad (2e)$$

$$y_4 = 7y_2^{-2} - y_3 \quad (2f)$$

$$y_5 = 0,128 - 17y_2^{-2} + 25y_3 \quad (2g)$$

$$y_6 = -0,128 + 17y_2^{-2} - 2y_3 \quad (2h)$$

$$y_7 = y_0(0,032 - 3y_2^{-2} + 0,5y_3) \quad (2i)$$

$$\lambda = y_4 + y_0(y_5 + y_0(y_6 + y_7)) \quad (2j)$$

Koeficijenti lokalnih gubitaka ξ_{lok} standardno su referencirani na kinetičku energiju srednje brzine strujanja u cijevi. U programskim rješenjima uobičajena je transformacija u kojoj se koeficijent lokalnog gubitka veže uz protok. Međusobni odnos tih koeficijenta definiran je izrazom:

$$m = \frac{0,002517 \xi_{lok}}{d^4} \quad (3)$$

Nadalje, sustav jednadžbi kontinuiteta mora biti zadovoljen za sve čvorove analiziranog sustava:

$$\sum_j Q_{ij} - D_i = 0 \quad (4)$$

gdje je: D_i zahtjevani protok potrošnje u čvoru i (po dogovoru protok u čvor predstavlja dotok te mu se dodjeljuje pozitivan predznak).

Nakon definiranja vrijednosti energija za fiksne čvorove (vremenski nepromjenjive vrijednosti), proračunavaju se energetske razine E_i za sve preostale čvorove sustava, zajedno s odgovarajućim protocima Q_{ij} u svim cijevima sustava.

Metoda rješavanja započinje s inicijalnom „procjenom“ protoka u svakoj pojedinoj cijevi bez nužnog uvjeta zadovoljenja jednadžbe kontinuiteta. Iterativnom procedurom proračunavaju se vrijednosti energija u čvorovima na način da se rješava matricna jednadžba:

$$\mathbf{AH} = \mathbf{F} \quad (6)$$

gdje je: \mathbf{A} ($N \times N$) Jacobianova matrica; \mathbf{H} ($N \times 1$) vektor nepoznatih energija u čvorovima; \mathbf{F} ($N \times 1$) vektor članova desne strane.

Dijagonalni i elementi Jacobianove matrice su:

$$A_{ii} = \sum_j p_{ij} \quad (7a)$$

Preostali članovi Jacobianove matrice mogu se zapisati:

$$A_{ij} = -p_{ij} \quad (7b)$$

gdje je: p_{ij} inverzna derivacija energetske gubitka na potezu od čvora i do čvora j temeljem protoka Q_{ij} proračunatog na način:

$$p_{ij} = \frac{1}{NR|Q_{ij}|^{N-1} + 2m|Q_{ij}|} \quad (8a)$$

odnosno za slučaj pumpe:

$$p_{ij} = \frac{1}{n\omega^2 r (Q_{ij}/\omega)^{n-1}} \quad (8b)$$

Svaki član desne strane sadrži ukupni „neizbalansirani“ protok za pojedini čvor plus korekcijski faktor protoka:

$$F_i = \left(\sum_j Q_{ij} - D_i \right) + \sum_j y_{ij} + \sum_f p_{if} H_f \quad (9)$$

Zadnji član prethodnog izraza primjenjuje se za članove koji povezuju „slobodni“ čvor i s čvorom za koji je poznata (definirana) vrijednost energije (npr, vodosprema). Faktor korekcije y_{ij} izražava se sljedećim jednadžbama za cijevi i pumpe ($\text{sgn} = 1$ za $x > 0$ i -1 za ostalo; Q_{ij} je uvijek pozitivan za pumpu):

$$y_{ij} = p_{ij} \left(R(Q_{ij})^N + m(Q_{ij})^2 \right) \text{sgn}(Q_{ij}) \quad (10a)$$

$$y_{ij} = -p_{ij} \omega^2 \left[H_0 - r(Q_{ij}/\omega)^n \right] \quad (10b)$$

Nakon proračuna (rješavanja) sustava 6 dobivaju se nove vrijednosti protoka u cijevima temeljem izraza:

$$Q_{ij-NOVO} = Q_{ij-STARO} - (y_{ij} - p_{ij} (E_i - E_j)) \quad (11)$$

Ukoliko je suma apsolutnih promjena protoka veća od sumarnog protoka kroz sve priključene cijevi za neku definiranu vrijednost tolerancije (npr. 0,001) jednadžbe 6 i 11 se rješavaju ponovno. Potrebno je napomenuti da rezultat proračuna jednadžbe 11 već u prvoj iteraciji uvijek zadovoljava uvjet kontinuiteta za svaki pojedini čvor.

Ventili i drugi armaturni elementi sustav mogu se opisivati do željenog stupnja detaljnosti. Za ventile se uobičajeno koristi obrazac u kojem se otvorenom ventilu pripisuje lokalni gubitak u iznosu $\xi_{V-OT} = 0,04$, dok se u slučaju potpune zatvorenosti lokalno postavlja vrlo visoka vrijednost energetskog gubitka (npr. $10^8 Q$).

Pri uspostavi modela određenu pažnju potrebno je posvetiti i pumpama, kontrolnim ventilima i vodospremama. Tijekom provedbe proračuna provodi se kontrola stanja tih elemenata sustava, s ciljem onemogućenja pojave reverznog toka kroz pumpe i kontrolne ventile te prekida istjecanja iz vodospreme nakon njenog pražnjenja (nakon postizanja definirane minimalne razine vode u vodospremi).