

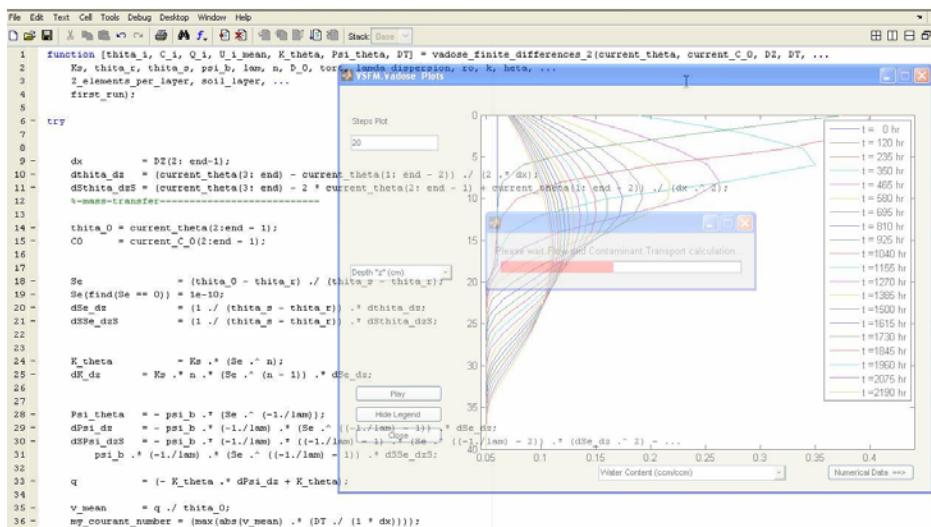


ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ  
ΤΜΗΜΑ  
ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ

Μ Π Ρ Ο Υ Ζ Ο Σ   Χ Ρ Η Σ Τ Ο Σ

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

“Ανάπτυξη μονοδιάστατου μοντέλου ροής και μεταφοράς ρύπου  
στην ακόρεστη και κορεσμένη ζώνη σε περιβάλλον Matlab”



Εξεταστική Επιτροπή:

Καρατζάς Γεώργιος (Επιβλέπων)

Καλογεράκης Νικόλαος

Νικολαΐδης Νικόλαος

ΣΕΠΤΕΜΒΡΙΟΣ 2006

## ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Για την εκπόνηση της παρούσας εργασίας αλλά και την διεκπεραίωση των Μεταπτυχιακών μαθημάτων του ΜΔΕ του τμήματος Μηχανικών Περιβάλλοντος, μου χορηγήθηκε υποτροφία από το τμήμα Υποτροφιών Εσωτερικού του **Κοινωφελούς Ιδρύματος Αλέξανδρος Σ. Ωνάσης**. Θα ήθελα, σ' αυτό το σημείο να ευχαριστήσω το Ίδρυμα Αλέξανδρος Σ. Ωνάσης για την πολύτιμη υποστήριξη κατά την διάρκεια των σπουδών μου, χωρίς την οποία η φοίτησή μου θα ήταν δυσκολότερη.

Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Καθηγητή **κ. Γεώργιο Καρατζά** για την επίβλεψη της παρούσας εργασίας, αλλά και την συμβολή του για την αντιμετώπιση των δυσκολιών που προκύψαν κατά την διάρκεια της εκπόνησής της.

## ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

|   |    |
|---|----|
| 1. Εισαγωγή .....   | 4  |
| 2. Περιγραφή Ροής Στην Ακόρεστη και Κορεσμένη Ζώνη.....           | 6  |
| 2.1 Γενικά .....  | 6  |
| 2.2 Φαινόμενα της εδαφικής ζώνης .....                            | 8  |
| 2.2.1 Ατμοσφαιρική σύζευξη-Διήθηση από την επιφάνεια .....        | 8  |
| 2.2.2 Πραγματική εξάτμιση .....                                   | 10 |
| 2.2.3 Θερμοκρασία της επιφάνειας του εδάφους.....                 | 12 |
| 2.2.4 Πραγματική διαπνοή .....                                    | 12 |
| 2.2.5 Διήθηση και απορροή.....                                    | 15 |
| 2.3 Ακόρεστη ζώνη .....   | 17 |
| 2.3.1 Γενικά .....  | 17 |
| 2.3.2 Συμπεριφορά υπόγειου νερού στην ακόρεστη ζώνη.....          | 18 |
| 2.3.3 Η χαρακτηριστική καμπύλη του εδαφικού νερού .....           | 22 |
| 2.3.4 Το φαινόμενο της υστέρησης.....                             | 23 |
| 2.3.5 Εξισώσεις ροής στην ακόρεστη ζώνη .....                     | 25 |
| 2.3.6 Εξισώσεις μεταφοράς ρύπου στην ακόρεστη ζώνη.....           | 27 |
| 2.3.7 Προσδιορισμός των ιδιοτήτων εδάφους .....                   | 29 |
| 2.3.7.1 Υπολογισμός χαρακτηριστικής καμπύλης εδαφικού νερού ..... | 29 |
| Το μοντέλο των Brooks και Corey .....                             | 29 |
| Το μοντέλο του van Genuchten .....                                | 30 |
| 2.3.7.2 Η υδραυλική αγωγιμότητα .....                             | 31 |
| 2.4 Κορεσμένη ζώνη .....  | 33 |
| 2.4.1 Γενικά .....  | 33 |
| 2.4.2 Νόμος του Darcy .....                                       | 33 |
| 2.4.3 Εξισώσεις ροής στην κορεσμένη ζώνη .....                    | 36 |
| 2.4.4 Εξισώσεις μεταφοράς ρύπου στην κορεσμένη ζώνη .....         | 36 |
| 2.4.4.1 Μεταφορά λόγω διαφοράς συγκέντρωσης .....                 | 37 |
| 2.4.4.2 Συμμεταφορά .....   | 38 |
| 2.4.4.3 Μηχανική διασπορά.....                                    | 40 |
| 2.4.4.4 Υδροδυναμική διασπορά .....                               | 41 |

|   |    |
|---|----|
| 2.4.4.5 Η εξίσωση συμμεταφοράς-διασποράς για μεταφορά διαλυμένων ουσιών ..... | 43 |
| 3. Αριθμητική Επίλυση Εξισώσεων Ροής.....                                     | 46 |
| 3.1 Γενικά .....  | 46 |
| 3.2 Κυριότερες αριθμητικές μέθοδοι .....                                      | 46 |
| 3.3 Σύγκριση ΜΠΣ με ΜΠΔ .....   | 47 |
| 3.4 Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών .....                                       | 48 |
| 3.4.1 Αρχή της μεθόδου .....  | 48 |
| 3.4.2 Υπολογισμός παραγώγων.....  | 48 |
| 3.4.2.1 Γενικά .....  | 48 |
| 3.4.2.2 Μερικές διαφορικές εξισώσεις .....                                    | 48 |
| 3.4.3 Αρχικές και συνοριακές συνθήκες .....                                   | 49 |
| 3.4.3.1 Πρώτου τύπου συνοριακές συνθήκες.....                                 | 50 |
| 3.4.3.2 Δεύτερου τύπου συνοριακές συνθήκες .....                              | 51 |
| 3.5 Σφάλμα του ισοζυγίου μάζας.....   | 51 |
| 3.6 Courant number ( $C_r$ ) .....  | 52 |
| 4. Ανάπτυξη Αλγορίθμου σε Γλώσσα Matlab.....                                  | 54 |
| 4.1 Μαθηματικό υπόβαθρο .....   | 54 |
| 4.1.1 Ακόρεστη ζώνη.....  | 54 |
| 4.1.1.1 Διακριτοποίηση.....   | 54 |
| 4.1.1.2 Εξισώσεις ροής ύδατος.....  | 56 |
| 4.1.1.3 Εξισώσεις μεταφοράς ρύπου .....                                       | 58 |
| 4.1.2 Κορεσμένη ζώνη .....  | 60 |
| 4.1.2.1 Διακριτοποίηση.....   | 60 |
| 4.1.2.2 Εξισώσεις ροής ύδατος.....  | 61 |
| 4.1.2.3 Εξισώσεις μεταφοράς ρύπου .....                                       | 63 |
| 4.2 Περιγραφή παραθυρικού περιβάλλοντος .....                                 | 65 |
| 4.2.1 Ακόρεστη ζώνη.....  | 68 |
| 4.2.1.1 Εισαγωγή δεδομένων ροής .....   | 68 |
| Εισαγωγή εδαφικών χαρακτηριστικών .....                                       | 68 |
| Εισαγωγή χημικών χαρακτηριστικών.....   | 69 |
| Εισαγωγή αριθμητικών παραμέτρων .....   | 70 |

|  |     |
|--|-----|
| Εισαγωγή αρχικών και συνοριακών συνθηκών ..... | 71  |
| 4.2.1.2 Επίλυση μοντέλου ροής.....             | 72  |
| 4.2.1.3 Εμφάνιση αποτελεσμάτων .....           | 73  |
| 4.2.2 Κορεσμένη ζώνη .....                     | 75  |
| 4.2.2.1 Εισαγωγή δεδομένων ροής .....          | 75  |
| Εισαγωγή εδαφικών χαρακτηριστικών .....        | 76  |
| Εισαγωγή χημικών χαρακτηριστικών.....          | 77  |
| Εισαγωγή αριθμητικών παραμέτρων .....          | 77  |
| Εισαγωγή αρχικών και συνοριακών συνθηκών ..... | 78  |
| 4.2.2.2 Επίλυση μοντέλου ροής.....             | 79  |
| 4.2.2.3 Εμφάνιση αποτελεσμάτων .....           | 80  |
| 5. Παραδείγματα Επιλύσεων .....                | 83  |
| 6. Συμπεράσματα – Προτάσεις .....              | 104 |
| Βιβλιογραφία .....                             | 106 |

## 1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Τα προβλήματα ρύπανσης του ανθρώπινου περιβάλλοντος γενικότερα και των υδάτων ειδικότερα, διογκώνονται καθημερινά λόγω της ανθρώπινης δραστηριότητας με ανεπαρκή έως ελλιπή μέτρα προστασίας τους. Η πολιτική των βιομηχανιών για βραχυπρόθεσμο κέρδος, η ελαστική στάση της πολιτείας, η νοοτροπία της αδιαφορίας από το ευρύ κοινό, αλλά και η άγνοια από αρκετούς, αποτελούν κυρίως για τον ελλαδικό χώρο την αιτία διατήρησης αλλά και μεγέθυνσης των προβλημάτων ρύπανσης του περιβάλλοντος.

Τον τελευταίο χρόνο μάλιστα, ακούγονται συχνά από τα μέσα ενημέρωσης θέματα που αφορούν την ακαταλληλότητα πόσιμου νερού στην ευρύτερη περιοχή της Θεσσαλίας, λόγω της διήθησης νιτρικών και φωσφορικών αλάτων στα υπόγεια ύδατα, εξαιτίας της αλόγιστης χρήσης φυτοφαρμάκων, αλλά και για την ερημοποίηση παραλιακών περιοχών λόγω της αλόγιστης άρδευσης. Τέτοιου είδους προβλήματα, κάνουν επιτακτική την ανάγκη για δημιουργία σχεδίου διαχείρισης των υπόγειων υδάτων.

Στα πλαίσια του σχεδίου διαχείρισης των υδροφορέων, βασικό μέρος λαμβάνει ο τομέας της ανίχνευσης του ρύπου στον υδροφορέα και ο τομέας της πρόβλεψης μεταφοράς του μέσα σ' αυτόν, δίνοντας απαραίτητες πληροφορίες για την χάραξη του πεδίου δράσης και επομένως περιορισμού του ρύπου. Για το λόγο αυτό έχουν αναπτυχθεί διάφορα υπολογιστικά μαθηματικά μοντέλα που προσομοιάζουν το σύστημα «υπόγειο ύδωρ – έδαφος» παρέχοντας πληροφορίες για τη μελλοντική συμπεριφορά του υπό μελέτη συστήματος.

Τα μοντέλα αυτά χωρίζονται σε δύο βασικές κατηγορίες, όπως εξάλλου συμβαίνει σε μοντελοποιήσεις των περισσοτέρων φυσικών συστημάτων, τα αναλυτικά και τα αριθμητικά. Τα αναλυτικά μοντέλα δίνουν μια αρκετά προσεγγιστική πληροφορία λόγω των παραδοχών (π.χ. ισότροπος και ομοιογενής υδροφορέας) και αποτελούν μία αρχική επιλογή για μία γενικότερη εκτίμηση του προβλήματος. Εξάλλου, δεν είναι πάντοτε εφικτή μία αναλυτική λύση. Έτσι, στην περίπτωση της ακόρεστης ζώνης για παράδειγμα, όπου η διαπερατότητα και επομένως και η κίνηση του ύδατος είναι συνάρτηση της

υγρασίας του εδάφους, οι εξισώσεις που την περιγράφουν είναι αδύνατον να επιλυθούν αναλυτικά.

Τα αριθμητικά μοντέλα, για τα οποία θα γίνει αναλυτικότερη περιγραφή παρακάτω, είναι αυτά που δίνουν τη λύση στο πρόβλημα που αναφέρθηκε.

Το αντικείμενο που πραγματεύεται η παρούσα εργασία είναι η ανάπτυξη ενός εύχρηστου αλγορίθμου προσομοίωσης της κίνησης του ύδατος και μεταφοράς ρύπου στην ακόρεστη και κορεσμένη ζώνη του υπόγειου υδροφορέα. Ο αλγόριθμος του μοντέλου βασίζεται ουσιαστικά σε αριθμητική επίλυση των εξισώσεων σε μία διάσταση. Χρησιμοποιείται το μαθηματικό λογισμικό πακέτο «Matlab 7.1». Για την ευκολότερη χρήση του μοντέλου και διαχείριση των δεδομένων, ο βασικός κώδικας συνοδεύεται από ένα παραθυρικό περιβάλλον κατασκευασμένο στην ίδια γλώσσα προγραμματισμού.

Πριν την περιγραφή του συγκεκριμένου μοντέλου, γίνεται μία σύντομη ανάλυση των εξισώσεων που ισχύουν στις ζώνες του υπόγειου ύδατος (ακόρεστη και κορεσμένη), και σύγκριση των αριθμητικών μοντέλων πεπερασμένων διαφορών και πεπερασμένων στοιχείων.

## 2. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΡΟΗΣ ΣΤΗΝ ΑΚΟΡΕΣΤΗ ΚΑΙ ΚΟΡΕΣΜΕΝΗ ΖΩΝΗ

### 2.1 Γενικά

Τμήμα του νερού που πέφτει ως βροχή ή χιόνι, διηθείται μέσα στο έδαφος. Η ποσότητα του νερού που διηθείται εξαρτάται από έναν αριθμό παραγόντων. Για παράδειγμα, η διήθηση των κατακρημνισμάτων που πέφτουν πάνω στους πάγους της Γροιλανδίας μπορεί να είναι πολύ μικρή, ενώ αντίθετα, στο Σχήμα 2.1 στο υδατόρεμα που χάνεται μέσα σε μια σπηλιά, στη Georgia των ΗΠΑ, όλο το νερό γίνεται κατευθείαν υπόγειο νερό (USGS, 2006a).



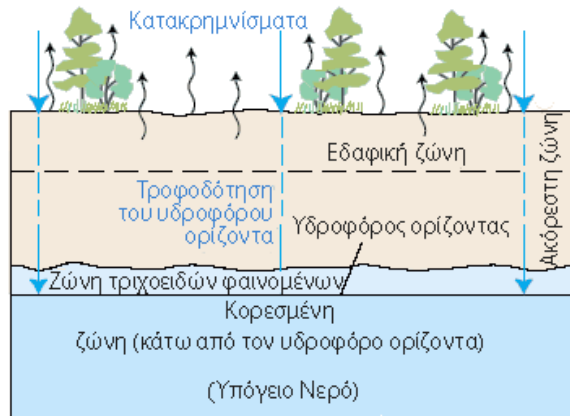
**Σχήμα 2.1:** Υδατόρεμα που χάνεται μέσα σε σπηλιά και όλο το νερό γίνεται υπόγειο νερό (USGS, 2006a).

Με βάση τα παραπάνω, τμήμα του επιφανειακού νερού μένει στην επιφάνεια του εδάφους και μπορεί να καταλήξει τελικά σε ένα υδατόρεμα, ενώ ένα άλλο τμήμα, μπορεί να διηθηθεί πιο βαθιά και να τροφοδοτήσει υπόγειους υδροφορείς. Αν οι υδροφορείς είναι κοντά στην επιφάνεια και αρκετά πορώδεις, ώστε να επιτρέπουν τη γρήγορη κίνηση του νερού, μπορεί να κατασκευαστούν πηγάδια και να αντληθεί νερό για διάφορες ανάγκες. Το νερό μπορεί να μεταφερθεί σε μεγάλες αποστάσεις ή να μείνει αποθηκευμένο υπόγεια για μεγάλα χρονικά διαστήματα πριν επανέλθει στην επιφάνεια βγαίνοντας σε ποτάμια ή στη θάλασσα (USGS, 2006a).

Καθώς το νερό διηθείται προς το υπέδαφος, σχηματίζει συνήθως μια **ακόρεστη** και μια **κορεσμένη** ζώνη. Το άνω μέρος της ακόρεστης ζώνης είναι η **εδαφική**



**ζώνη.** Η εδαφική ζώνη έχει κενά που δημιουργούνται από τις ρίζες των φυτών, τα οποία επιτρέπουν στο νερό να διηθηθεί. Το νερό στην ανώτερη αυτή ζώνη μπορεί να χρησιμοποιηθεί από τα φυτά. Στην ακόρεστη ζώνη, οι πόροι του εδαφικού σχηματισμού δεν είναι τελείως πληρωμένοι με νερό. Κάτω από την ακόρεστη ζώνη βρίσκεται η κορεσμένη, στην οποία το νερό γεμίζει όλους τους πόρους του εδάφους (Σχήμα 2.2, USGS, 2006a).



**Σχήμα 2.2:** Σχηματική αναπαράσταση κατανομής υπόγειου ύδατος (USGS, 2006a).

Η ποσοτικοποίηση και μοντελοποίηση ενός προβλήματος στην περίπτωση μη σημειακής πηγής ρύπανσης, αντιμετωπίζεται από τους περιβαλλοντολόγους ως ένα δύσκολο πρόβλημα κυρίως λόγω της ετερογένειας του υποκείμενου περιβάλλοντος. Η μη γραμμική φύση των διαδικασιών ροής και μεταφοράς μάζας σε μέσα με διαφορετικό βαθμό κορεσμού κάνει πολύ δύσκολη την περιγραφή και τη μαθηματική αντιμετώπιση του προβλήματος. Ακόμη και αν οι βασικές φυσικές, χημικές και βιολογικές διαδικασίες που λαμβάνουν χώρα στο υπέδαφος μπορούσαν να ποσοτικοποιηθούν κατάλληλα με τη μορφή μαθηματικών εξισώσεων (συνήθως μερικών διαφορικών) και συνεπώς να επιλυθούν αποτελεσματικά και με ακρίβεια, η χωρική και χρονική ετερογένεια του τρισδιάστατου εδαφικού προφίλ θα εξακολουθούσε να δημιουργεί προβλήματα διαχείρισης του μοντέλου. Η ακριβής περιγραφή και παρακολούθηση της χωρο-χρονικής διαφοροποίησης της υπεδάφιας ροής και μεταφοράς μάζας μέσω άμεσων μετρήσεων αποτελεί πρόκληση για τους εδαφολόγους, υδρογεωλόγους και μηχανικούς (Mohanty and van Genuchten, 1996).

## **2.2 Φαινόμενα της εδαφικής ζώνης**

### **2.2.1 Ατμοσφαιρική σύζευξη-Διήθηση από την επιφάνεια**

Σημαντικό στη μοντελοποίηση της ακόρεστης ζώνης είναι η ακριβής εκτίμηση των συνοριακών συνθηκών στην επιφάνεια. Η πιο σημαντική μεταβλητή που πρέπει να ποσοτικοποιηθεί είναι το μέγεθος της επιφανειακής διήθησης και της πραγματικής εξάτμισης ή αλλιώς, η μοναδιαία ροή στο όριο της επιφάνειας. Σύγχρονα λογισμικά πακέτα προσδιορίζουν αυτή την τιμή συνδυάζοντας τη θερμική κατάσταση και την υγρασία στην επιφάνεια του εδάφους, με τις κλιματολογικές συνθήκες πάνω από αυτή (VADOSE/W, 2002).

Συνήθως, η μοντελοποίηση της ροής λόγω εξάτμισης περιοριζόταν σε μεθόδους που εκτιμούσαν το μοναδιαίο ρυθμό ροής λόγω εξάτμισης με βάση την τιμή του δυναμικού εξάτμισης. Η τιμή αυτή υπολογίζεται με βάση μια εξίσωση όπου το δυναμικό εξάτμισης αποτελεί συνάρτηση μιας παραμέτρου ανάμειξης, πολλαπλασιασμένης με τη διαφορά της πίεσης κορεσμού του ατμού στην επιφάνεια του εδάφους, με αυτή του αέρα πάνω από την επιφάνεια. Η προσέγγιση αυτή αποτελεί τη βάση της ευρέως διαδεδομένης μεθόδου του Penman (1948), που θεωρεί ότι η επιφάνεια του εδάφους είναι μονίμως κορεσμένη. Άλλες μέθοδοι υπολογισμού του δυναμικού εξάτμισης είναι του Thornthwaite (1948) που βασίζεται στη θερμοκρασία και των Priestly-Taylor (1972) που βασίζεται στην ενέργεια, κάνοντας επίσης τη θεμελιώδη θεώρηση ότι η επιφάνεια του εδάφους είναι κορεσμένη (VADOSE/W, 2002).

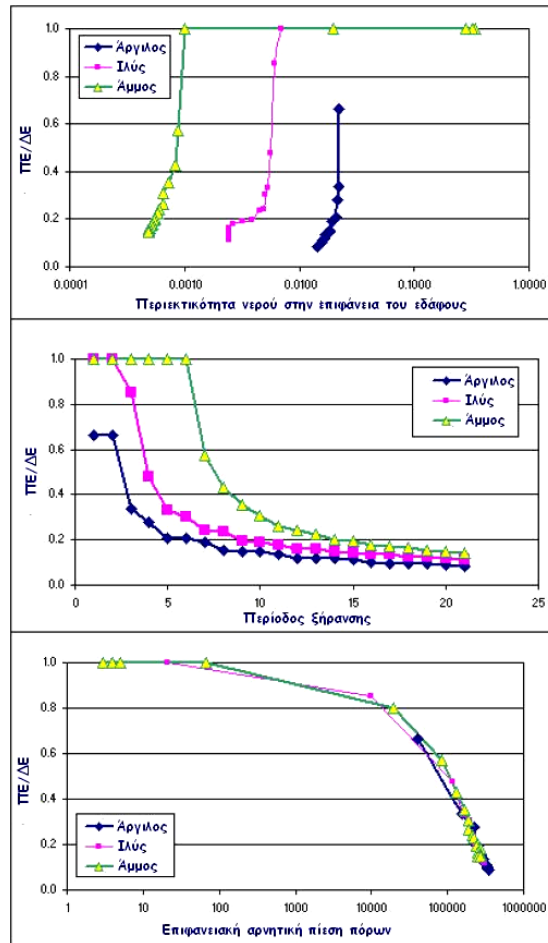
Σήμερα είναι γνωστό ότι ο ρυθμός πραγματικής εξάτμισης ισούται με το δυναμικό εξάτμισης μόνο στην περίπτωση που το έδαφος είναι κορεσμένο, και ότι ο ρυθμός πραγματικής εξάτμισης μειώνεται σε σχέση με το δυναμικό εξάτμισης όσο μειώνεται ο βαθμός κορεσμού στην επιφάνεια του εδάφους. Το ερώτημα είναι ποια είναι η σχέση μεταξύ της πραγματικής εξάτμισης (ΠΕ) και του δυναμικού εξάτμισης (ΔΕ). Ο Wilson (1990, 1994) έδειξε ότι αν ο λόγος ΠΕ/ΔΕ παρασταθεί γραφικά για διάφορες παραμέτρους του εδάφους της επιφάνειας, προκύπτει μια σημαντική παρατήρηση. Έτσι, σχεδίασε τις γραφικές παραστάσεις του ΠΕ/ΔΕ συναρτήσει του χρόνου, της περιεκτικότητας σε νερό και της πίεσης του εδαφικού νερού για τρεις πολύ διαφορετικούς τύπους

εδαφών (ιλύς, άμμος και πλαστική άργιλος) κάτω από τις ίδιες ατμοσφαιρικές κλιματολογικές συνθήκες (χρησιμοποιώντας έναν εργαστηριακό θάλαμο ελεγχόμενων κλιματολογικών συνθηκών). Στην περίπτωση των γραφημάτων ΠΕ/ΔΕ συναρτήσει του χρόνου και της περιεκτικότητας του εδάφους σε νερό, δεν υπάρχει συσχετισμός μεταξύ των καμπυλών για τους διάφορους εδαφικούς τύπους. Όταν όμως ο λόγος ΠΕ/ΔΕ παρίσταται συναρτήσει της αναρρόφησης του εδάφους (αρνητική πίεση του νερού), όλες οι καμπύλες για τα διαφορετικά εδαφικά δείγματα συμπίπτουν (όπως φαίνεται και από τα παραδείγματα του Σχήμα 2.3) (VADOSE/W, 2002).

Η παρατήρηση αυτή είναι πολύ σημαντική γιατί δείχνει ότι ο ρυθμός πραγματικής εξάτμισης δεν εξαρτάται από οποιαδήποτε μετρήσιμη εδαφική παράμετρο (π.χ. από την περιεκτικότητα σε νερό, τη θερμοκρασία ή το χρόνο έκθεσης σε ξηρασία) αλλά από την εντατική κατάσταση του εδάφους (αρνητική πίεση του νερού). Έτσι, προκειμένου να προσδιοριστεί επακριβώς η πραγματική εξάτμιση, πρέπει αρχικά να είναι γνωστή η πίεση του νερού των πόρων (και όχι η περιεκτικότητα σε νερό) στο έδαφος, ανεξάρτητα από τον τύπο αυτού (VADOSE/W, 2002).

Οι εξισώσεις πεπερασμένων στοιχείων για συζευγμένη ροή μάζας και θερμότητας (με ροή ατμού), είναι απολύτως απαραίτητες για την επίλυση αυτής της συνοριακής συνθήκης. Η αναρρόφηση του εδάφους μπορεί να υπολογιστεί ανεξάρτητα, με βάση τη θερμοκρασία του εδάφους. Προκειμένου όμως να υπολογιστεί η πίεση του κορεσμένου ατμού στην επιφάνεια του εδάφους (που απαιτείται για την εφαρμογή της τροποποιημένης εξίσωσης του ρυθμού εξάτμισης) είναι απαραίτητο να γνωρίζουμε τη θερμοκρασία στην επιφάνεια και τη σχετική υγρασία του αέρα στους εδαφικούς πόρους στην επιφάνεια (VADOSE/W, 2002).

Συνήθως χρησιμοποιείται η μέθοδος Penman-Wilson για τον υπολογισμό της πραγματικής εξάτμισης στην επιφάνεια του εδάφους έτσι ώστε αυτή να υπολογίζεται συναρτήσει του δυναμικού εξάτμισης και για όλες τις συνθήκες εδαφικής υγρασίας, ανεξάρτητα από τον εδαφικό τύπο και το ιστορικό ξήρανσης (VADOSE/W, 2002).



Σχήμα 2.3: Σύγκριση του λόγου ΠΕ/ΔΕ για διάφορα κριτήρια και εδάφη.

### 2.2.2 Πραγματική εξάτμιση

Η ατμοσφαιρική σύζευξη επιτυγχάνεται υπολογίζοντας τη ροή στο έδαφος λόγω εξάτμισης με βάση τη σχέση των Penman-Wilson (1990, 1994), ως ακολούθως:

$$E = PE \left( \frac{h_r - \frac{V_{p.sat.air}}{V_{p.sat.soil}} h_A}{1 - \frac{V_{p.sat.air}}{V_{p.sat.soil}} h_A} \right) \quad (2.1)$$

όπου:

$E$ : κατακόρυφη ροή εξάτμισης (mm/day),

$$PE: \frac{\Gamma(Q - G) + \lambda V E_a}{\lambda(\Gamma + V)} \text{ δυναμικό εξάτμισης,}$$

$\Gamma$ : κλίση της καμπύλης πίεσης του κορεσμένου ατμού συναρτήσει της θερμοκρασίας, κατά τη μέση θερμοκρασία του αέρα (kPa/°C),

$G$ : ροή θερμότητας στο έδαφος (MJ/mm<sup>2</sup>·day),

$\lambda$ : λανθάνουσα θερμότητα εξάτμισης (2.45 MJ/kg),

$Q$ : καθαρή ενέργεια ακτινοβολίας διαθέσιμη στην επιφάνεια (MJ/mm<sup>2</sup>·day),

$V$ : ψυχρομετρική σταθερά,

$E_a$ : εκθετική συνάρτηση η οποία αντιπροσωπεύει την χωρητικότητα της ατμόσφαιρας να μεταφέρει υδρατμούς:  $f(u)P_a(B-A)$ ,

$f(u)$ : συνάρτηση που εξαρτάται από την ταχύτητα του αέρα, την τραχύτητα της επιφάνειας και τη διάχυση:  $0.35(1+0.15U_a)$ ,

$U_a$ : ταχύτητα ανέμου (km/hr),

$P_a$ : πίεση του ατμού στον αέρα πάνω από την επιφάνεια εξάτμισης (kPa),

$B$ : το αντίστροφο της σχετικής υγρασίας του αέρα =  $1/h_a$ ,

$A$ : το αντίστροφο της σχετικής υγρασίας στην επιφάνεια του εδάφους =  $1/h_s$ .

Η σχέση των Penman-Wilson θεωρεί καθαρή ακτινοβολία, ταχύτητα ανέμου, και τη σχετική υγρασία του αέρα και της επιφάνειας του εδάφους στον υπολογισμό της εξάτμισης από μια εδαφική επιφάνεια μη κορεσμένη. Όταν η επιφάνεια του εδάφους είναι κορεσμένη, η παραπάνω εξίσωση απλοποιείται στη συμβατική μέθοδο Penman, δεδομένου ότι η υγρασία του εδάφους είναι ίση με 100% και επομένως ο παράγοντας  $A$  στην παραπάνω εξίσωση γίνεται ίσος με τη μονάδα. Η σχετική υγρασία της επιφάνειας του εδάφους εκτιμάται με την ταυτόχρονη επίλυση των συζευγμένων εξισώσεων ροής θερμότητας και υγρασίας. Η προσθήκη του παράγοντα της ροής του ατμού στην εξίσωση ισοζυγίου μάζας εξασφαλίζει ότι η ροή της υγρασίας δεν σταματά όταν η υδραυλική διαπερατότητα μειώνεται λόγω ξήρανσης. Έτσι, η ροή του ατμού μπορεί να τροφοδοτεί την επιφάνεια του εδάφους και η εξίσωση Penman-Wilson υπολογίζει την αποβολή της στην ατμόσφαιρα (VADOSE/W, 2002).

### 2.2.3 Θερμοκρασία της επιφάνειας του εδάφους

Οι θερμοκρασίες στο εσωτερικό του εδαφικού προφίλ απαιτούνται για την επίλυση των εξισώσεων ροής θερμότητας και υγρασίας. Η θερμοκρασία της επιφάνειας μπορεί να εκτιμηθεί (για συνθήκες όπου δεν υπάρχει παρουσία στρώματος χιονιού) από την ακόλουθη εξίσωση (VADOSE/W, 2002):

$$T_s = T_a + \frac{1}{vf(u)}(Q - E) \quad (2.2)$$

όπου:

$T_s$ : θερμοκρασία στην επιφάνεια του εδάφους ( $^{\circ}\text{C}$ ),

$T_a$ : θερμοκρασία του αέρα πάνω από την επιφάνεια του εδάφους ( $^{\circ}\text{C}$ ),

$v$ : ψυχομετρική σταθερά,

$Q$ : καθαρή ενέργεια ακτινοβολίας (μείον την ενέργεια διαπνοής) διαθέσιμη στην επιφάνεια (mm/day),

$f(u)$ : συνάρτηση που εξαρτάται από την ταχύτητα του αέρα, την τραχύτητα της επιφάνειας και τη διάχυση:  $0.35(1+0.15U_a)$ ,

$E$ : κατακόρυφη ροή εξάτμισης (mm/day).

Η εξίσωση αυτή ουσιαστικά υποδηλώνει ότι η θερμοκρασία του εδάφους αυξάνεται από ενέργεια που δεν καταναλώνεται κατά τις διαδικασίες εξάτμισης ή διαπνοής.

### 2.2.4 Πραγματική διαπνοή

Η ποσότητα νερού που τα φυτά διαπνέουν μεταβάλλεται γεωγραφικά και χρονικά. Υπάρχουν διάφοροι παράγοντες που καθορίζουν τους ρυθμούς διαπνοής, όπως (USGS, 2006a):

- **Θερμοκρασία:** Οι ρυθμοί διαπνοής ανεβαίνουν όσο ανεβαίνει η θερμοκρασία ειδικά στις εποχές ανάπτυξης των φυτών, όταν ο αέρας είναι ζεστός.
- **Σχετική υγρασία:** Όσο αυξάνει η σχετική υγρασία του αέρα που περιβάλλει το φυτό ο ρυθμός διαπνοής πέφτει. Είναι πιο εύκολο να εξατμιστεί νερό σε ξηρό παρά σε υγρό αέρα.

- **Άνεμος:** Αύξηση της ταχύτητας του ανέμου κοντά στο φυτό αυξάνει τη διαπνοή.
- **Τύπος φυτού:** Διαφορετικά φυτά έχουν διαφορετικούς ρυθμούς διαπνοής. Φυτά που μεγαλώνουν σε ξηρά κλίματα, όπως οι κάκτοι, διαπνέουν λιγότερο από τα άλλα φυτά.

Η βλάστηση παίζει πολύ σημαντικό και δυναμικό ρόλο στην όλη διαδικασία της εξατμισοδιαπνοής. Η επίδραση αυτή ενσωματώνεται συνήθως χρησιμοποιώντας μια κομβική πηγή αναρρόφησης λόγω βλάστησης που συνδυάζεται με έναν παράγοντα επιφανειακής ενέργειας που βασίζεται στην κάλυψη από σκίαση. Η ποσότητα της πραγματικής κομβικής αναρρόφησης εξαρτάται επίσης από το βάθος και την πυκνότητα του ριζικού συστήματος και την (αρνητική) πίεση του νερού των πόρων (VADOSE/W, 2002).

Η έλλειψη του διαθέσιμου για τη βλάστηση νερού ή/και ο υψηλός βαθμός εξατμισμού αυτού, προκαλεί τη βιολογική αντίδραση των περισσότερων φυτών με το κλείσιμο των στομάτων πόρων, τη μείωση της διαπνοής και τη μείωση των μεταβολικών αντιδράσεων (Saxton, 1982). Κάτω από συνεχή και αυξανόμενη πίεση, το φυτό φτάνει στο σημείο μααρασμού του. Το σημείο μααρασμού έχει σαν αποτέλεσμα την πτώση των φύλλων και το θάνατο του ιστού (Saxton, 1982). Έτσι θα πρέπει να εφαρμόζεται μια εξίσωση περιορισμού της υγρασίας που προορίζεται για τα φυτά, η οποία να προσδιορίζει την ποσοστιαία μείωση στην ικανότητα των φυτών να τραβούν το νερό ενώ η αρνητική πίεση του νερού αυξάνεται στο ακόρεστο έδαφος. Μια τυπική εξίσωση περιορισμού της υγρασίας των φυτών δίνεται παρακάτω. Σε αυτή την εξίσωση το φυτό φτάνει σε σημείο μααρασμού σε μια αρνητική τιμή της πίεσης του νερού των πόρων της τάξης των -100kPa και αδυνατεί να τραβήξει νερό όταν η πίεση φτάσει τα -1500kPa (VADOSE/W, 2002).

Ο δείκτης της επιφάνειας του φυλλώματος, αφορά τη μείωση της ποσότητας της καθαρής ακτινοβολίας που φτάνει στην επιφάνεια του εδάφους, πράγμα που έχει σαν αποτέλεσμα τη μείωση της πραγματικής ποσότητας νερού που εξατμίζεται. Με άλλα λόγια, ο δείκτης της επιφάνειας του φυλλώματος, ελέγχει το πως η ενέργεια στην επιφάνεια μοιράζεται μεταξύ αυτής που είναι διαθέσιμη

για απευθείας εξάτμιση από το έδαφος και αυτής που είναι διαθέσιμη για τη διαπνοή των φυτών (VADOSE/W, 2002).

Είναι επίσης απαραίτητη η εισαγωγή του προφίλ του βάθους των ριζών. Αυτό καθορίζει το βάθος πάνω από το οποίο η βλάστηση θα «εξάγει» νερό από το εδαφικό προφίλ. Είναι σημαντικό να σημειωθεί ότι το βάθος των ριζών δεν πρέπει να ξεπερνά το συνολικό πάχος των στοιχείων του προς προσομοίωση φυσικού συστήματος, είτε με πεπερασμένα στοιχεία είτε με πεπερασμένες διαφορές. Όταν έχουν οριστεί πλέον όλες οι εξισώσεις και έχουν εφαρμοστεί σε έναν κλιματικό κόμβο της επιφάνειας, χρησιμοποιούνται με τον τρόπο που περιγράφεται παρακάτω (VADOSE/W, 2002).

Η πραγματική εξάτμιση  $E$ , υπολογίζεται από την εξίσωση 2.1. Η τιμή της έπειτα τροποποιείται, έτσι ώστε ένα μέρος της διαθέσιμης ενέργειας να διατίθεται στα φυτά, μέσω της σχέσης:

$$E = E^{-0.4LAI} \quad (2.3)$$

όπου  $LAI$  είναι ο δείκτης επιφάνειας του φυλλώματος για την εν λόγω ημέρα. Με βάση τον Tratch (1996), η τροποποιημένη τιμή εξάτμισης είναι ίση με το μηδέν εάν ο  $LAI$  είναι μεγαλύτερος από 2.7, ενώ αν είναι μικρότερος από 0.1 η εξάτμιση παίρνει τη μέγιστη τιμή της.

Ακολουθεί ο υπολογισμός του δυναμικού διαπνοής ( $PT$ ), η τιμή του οποίου σχετίζεται με το δυναμικό εξάτμισης και είναι ίση με αυτό, αν είναι  $LAI > 2.7$ . Το  $PT$  υπολογίζεται με βάση τη σχέση:

$$PT = PE \cdot (-0.21 + 0.7\sqrt{LAI}) \quad (2.4)$$

όπου  $PE$  είναι το δυναμικό εξάτμισης (mm/day). Η τιμή του  $PT$  αφορά τη διαθέσιμη ενέργεια στο φυτό. Αν το έδαφος είναι κορεσμένο, το σύνολο της ενέργειας αυτής εφαρμόζεται στις ρίζες σε συνάρτηση με το βάθος και το σχήμα των ριζών. Αν το έδαφος είναι μερικώς κορεσμένο η πραγματική τιμή διαπνοής μειώνεται περαιτέρω σύμφωνα με τη συνάρτηση περιορισμού της υγρασίας των φυτών:

$$AT = PRU \cdot PML \quad \text{με} \quad PRU = \frac{2PT}{R_r} \left( 1 - \frac{R_n}{R_r} \right) A_n \quad (2.5)$$



όπου:

$A_T$ : η πραγματική κομβική διαπνοή,

$R_T$ : το ολικό πάχος της ζώνης των ριζών,

$R_n$ : το βάθος του κόμβου που εξετάζεται,

$A_n$ : η επιφάνεια επιρροής του κόμβου που εξετάζεται,

$PML$ : η τιμή του παράγοντα περιορισμού της υγρασίας των φυτών για την παρούσα κομβική αρνητική πίεση των πόρων του εδάφους.

Τέλος πρέπει να σημειωθεί ότι το άθροισμα της πραγματικής εξάτμισης και της πραγματικής διαπνοής δεν μπορεί ποτέ να είναι μεγαλύτερο από το δυναμικό εξατμισοδιαπνοής στον κόμβο της επιφάνειας. Αυτό το κριτήριο χρησιμοποιείται για τη διατήρηση της ενέργειας.

### **2.2.5 Διήθηση και απορροή**

Τις ημέρες κατά τις οποίες δεν πραγματοποιείται ατμοσφαιρική κατακρήμνιση, η εξάτμιση υπολογίζεται για όλους τους επιφανειακούς κόμβους με βάση μια από τις μεθόδους που περιγράφηκαν παραπάνω. Αν υπάρχει κατακρήμνιση, τότε υπάρχουν και διάφορα εναλλακτικά σενάρια.

Αν η κατακρήμνιση στο επόμενο χρονικό βήμα που πρόκειται να επιλυθεί είναι μικρότερη από την αναμενόμενη πραγματική εξάτμιση, τότε η τιμή της συνοριακής συνθήκης που αφορά την επιφανειακή ροή πρέπει να είναι ίση με την τιμή της κατακρήμνισης μείον την πραγματική εξάτμιση και επομένως εφαρμόζεται μια αρνητική ροή στον κόμβο. Αν η κατακρήμνιση μείον την πραγματική εξάτμιση είναι θετική, τότε εφαρμόζεται μια θετική ροή λόγω διήθησης σαν συνοριακή συνθήκη στην επιφάνεια.

Αν η θετική ροή ως συνοριακή συνθήκη είναι τέτοια ώστε οι πιέσεις στην επιφάνεια να γίνονται θετικές, τότε η λύση προσεγγίζει αυτή τη θετική συνθήκη πίεσης και έπειτα ο επιφανειακός κόμβος αλλάζει σε νέα συνοριακή συνθήκη πίεσης και το χρονικό βήμα επαναλαμβάνεται. Μετά τη σύγκλιση με τη νέα συνοριακή συνθήκη πίεσης, γίνεται έλεγχος για το αν η υπολογιζόμενη ροή πλησιάζει σε αυτή που εφαρμόστηκε όταν χρησιμοποιήθηκε η αρχική συνοριακή ροή. Αν η κομβική ροή είναι μικρότερη από την αρχική ποσότητα, τότε η

απορροή υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\text{Απορροή} = \text{Κατακρήμνιση} - \text{ΑΕ} - \text{Διήθηση} \quad (2.6)$$

Η απορροή δεν πρέπει να είναι αρνητική εκτός και αν επιφανειακό νερό που έχει εισρεύσει προηγουμένως έχει αποθηκευτεί και επανεφαρμόζεται μέσω διήθησης σε ένα επόμενο χρονικό βήμα. Το επανεφαρμοζόμενο επιφανειακό νερό αποτελεί αρνητική απορροή.

Η απορροή μπορεί να χειριστεί με δύο τρόπους. Στη μια περίπτωση αγνοείται ο όγκος του νερού που διαρρέει εκτός εδαφικού συστήματος ή που δεν διηθείται. Σε αυτή την περίπτωση το νερό που βγαίνει από το σύστημα δεν είναι διαθέσιμο για επαναδιήθηση. Στη δεύτερη περίπτωση ο όγκος του επιφανειακού νερού συναθροίζεται και εφαρμόζεται σαν διηθούμενο σε επόμενα χρονικά βήματα. Αν το νερό λιμνάσει, η επίλυση προσδιορίζει, με βάση τον όγκο του νερού και του κοιλώματος στο οποίο αυτό βρίσκεται, την πίεση που πρέπει να εφαρμοστεί σαν συνοριακή συνθήκη σε επόμενο χρονικό βήμα. Συνήθως κατά την εξέταση της απορροής του επιφανειακού νερού υιοθετούνται αρκετές θεωρήσεις:

- Το νερό το οποίο κυλάει στην επιφάνεια του εδάφους και δεν διηθείται, θεωρείται ότι ρέει προς το χαμηλότερο σημείο του καννάβου όπου είναι διαθέσιμο για επαναδιήθηση. Η διάρκεια ροής στην επιφάνεια του εδάφους και το βάθος ροής, δεν λαμβάνονται υπόψη.
- Σε περίπτωση που η κλίση του εδάφους στο αριστερό και δεξί όριο του μοντέλου είναι κατηφορική, δεν μπορεί να προκύψει συγκέντρωση νερού στην επιφάνεια. Το νερό θεωρείται ότι ρέει εκτός των ορίων του μοντέλου. Το νερό μπορεί να λιμνάσει στην επιφάνεια μόνο στην περίπτωση που τα όρια του μοντέλου είναι επίπεδα ή έχουν ελαφρά κλίση προς τα πάνω. Ο αλγόριθμος υπολογίζει τον όγκο των κοιλωμάτων και προσδιορίζει το υψόμετρο μέχρι το οποίο αυτά γεμίζουν. Το υψόμετρο αυτό δίνει την τιμή της συνοριακής συνθήκης πίεσης. Αν τα κοιλώματα υπερχειλίσουν, το επιπλέον νερό λειτουργεί σαν πηγή για τον αμέσως διπλανό κόμβο από το σημείο της υπερχειλίσης.
- Το νερό δεν λιμνάζει σε λοφίσκους με επίπεδες κορυφές που βρίσκονται μέσα στα όρια του μοντέλου. Το νερό που ρέει επιφανειακά σε αυτούς

τους κόμβους, εφαρμόζεται σαν πηγή ροής στον κορυφαίο κόμβο οποιουδήποτε γειτονικού πρανούς στο επόμενο χρονικό βήμα.

### **2.3 Ακόρεστη ζώνη**

Ακόρεστη ζώνη ονομάζεται η περιοχή του υπεδάφους πάνω από το επίπεδο του υδροφόρου ορίζοντα. Το μεγαλύτερο διάστημα του έτους περιέχει αέρα αλλά και νερό στους πόρους της. Το πάχος της ζώνης αυτής μπορεί να είναι από μηδενικό (κάτω από λίμνες ή έλη) μέχρι και της τάξης των εκατοντάδων μέτρων, όπως είναι συνηθισμένο σε άνυδρες περιοχές (USGS, 2006b).

#### **2.3.1 Γενικά**

Η ταυτόχρονη μεταφορά νερού και ρύπων κάτω από μη κορεσμένες συνθήκες παίζει σημαντικό ρόλο σε πολλούς τομείς της μηχανικής και της γεωργίας. Στη γεωργία για παράδειγμα, πολλά χημικά όπως λιπάσματα, εντομοκτόνα καθώς και όλα εκείνα που βρίσκονται ούτως ή άλλως στο νερό που προορίζεται για άρδευση, εφαρμόζονται καθημερινά στο πεδίο. Κάποια από αυτά τα χημικά παραμένουν στη ζώνη των ριζών ή απορροφούνται από τα φυτά μέσω αυτών, ενώ άλλα αποστραγγίζονται και με τον τρόπο αυτό γίνονται πιθανοί παράγοντες ρύπανσης του υπόγειου νερού. Επίσης, η συχνή χρήση γης για την απόθεση μιας ευρείας ποικιλίας οικιακών και βιομηχανικών αποβλήτων επιτείνει τη σημασία μελέτης της ακόρεστης ζώνης. Για το λόγο αυτό είναι απαραίτητη η πλήρης κατανόηση της χημικής μεταφοράς στην ακόρεστη ζώνη, συμπεριλαμβανομένης της κατάλληλης ποσοτικοποίησης των αντίστοιχων διαδικασιών μεταφοράς (van Genuchten, 1982).

Για να περιγραφεί η ροή του ύδατος στην ακόρεστη ζώνη απαιτούνται δύο φαινομενολογικές σχέσεις. Η πρώτη αφορά τη σχέση μεταξύ της πίεσης νερού και της ογκομετρικής ποσότητας νερού. Η υδραυλική βαθμίδα στην ακόρεστη ζώνη είναι αρνητική. Όσο πιο ξηρό είναι το έδαφος τόσο πιο μεγάλη, κατ' απόλυτη τιμή, είναι η πίεση του νερού. Η δεύτερη, αφορά τη σχέση της υδραυλικής αγωγιμότητας συναρτήσει της ποσότητας και της πίεσης νερού. Και οι δύο είναι μη γραμμικές και εξαρτώνται από τις ιδιότητες του εδάφους.

### 2.3.2 Συμπεριφορά υπόγειου νερού στην ακόρεστη ζώνη

Ο υπόγειος υδροφόρος ορίζοντας προσδιορίζεται από εκείνα τα σημεία στα οποία η πίεση που εφαρμόζεται είναι ίση με την ατμοσφαιρική πίεση. Η πίεση του ύδατος στην ακόρεστη ζώνη καλείται και τριχοειδής πίεση και έχει αρνητική τιμή. Έτσι, μεγάλες τιμές τις πίεσης αυτής, κατ' απόλυτη τιμή, αντιστοιχούν σε μεγάλες αρνητικές πιέσεις του νερού και σε μικρούς βαθμούς κορεσμού του εδάφους σε νερό.

Το ολικό πορώδες ( $n$ ) ισούται με το άθροισμα του όγκου των πόρων που καταλαμβάνει το νερό ( $\theta_w$ ) και αυτού που καταλαμβάνει ο αέρας ( $\theta_a$ ). Η παραπάνω πρόταση μπορεί να εκφραστεί και με όρους βαθμού κορεσμού:

$$S_w + S_a = 1 \quad (2.7)$$

όπου:

$S_w$ : ο βαθμός κορεσμού σε νερό,

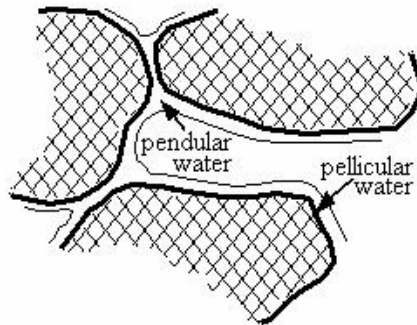
$S_a$ : ο βαθμός κορεσμού σε αέρα.

Είναι σημαντικό να γίνει κατανοητή η κατανομή του νερού στην κλίμακα του πορώδους μέσου. Θεωρώντας μία ξηρή εδαφική μάζα, το προστιθέμενο νερό αρχίζει να προσροφάται από τους κόκκους του εδάφους. Το λεπτό στρώμα του προσροφούμενου νερού (*pellicular water*) καλύπτει τους κόκκους και συγκρατείται από αυτούς υπό την επήρεια ισχυρών δυνάμεων Van der Waal's, οι οποίες αντιστοιχούν σε πιέσεις δεκάδων ατμοσφαιρών. Αυτές οι δυνάμεις συγκρατούν έως και 30 στρώματα μοριακού πάχους. Από εκεί και πέρα, όσο νερό και αν προστεθεί εναποτίθεται στα σημεία επαφής μεταξύ των κόκκων. Αυτή η επιπλέον ποσότητα νερού καλείται *pendular water*, και συγκρατείται από τριχοειδείς δυνάμεις οι οποίες οφείλονται στην επιφανειακή τάση μεταξύ της υγρής και της αέριας, προκαλώντας κίνηση του νερού προς μικρότερους πόρους. Το *pellicular* και το *pendular water* αναπαριστώνται στο Σχήμα 2.4.

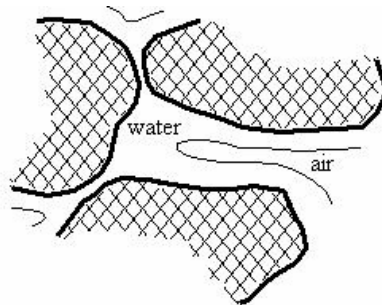
Η κίνηση του *pellicular* και το *pendular water*, είναι γενικά αργή, παρόλη την ύπαρξη μεγάλων υδραυλικών κλίσεων, λόγω του ότι το νερό κινείται διαμέσου του λεπτού στρώματος που έχει προσροφηθεί. Επιπλέον ποσότητα νερού έχει σαν αποτέλεσμα την κίνηση του νερού εξαιτίας των υδραυλικών κλίσεων. Ο βαθμός κορεσμού μιας συνεχούς φάσης που έχει την τάση να κινηθεί ελεύθερα

ονομάζεται *equilibrium wetting phase saturation*. Για τιμές βαθμού κορεσμού παραπάνω από την κρίσιμη, ο βαθμός κορεσμού καλείται *funicular*, και η ροή πλέον είναι δυνατή (Σχήμα 2.5).

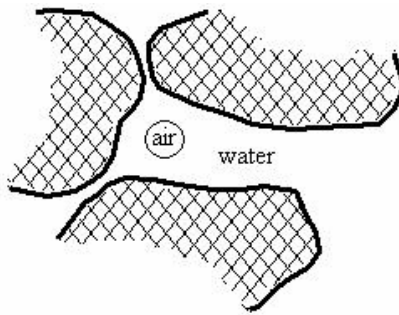
Επιπλέον ποσότητα νερού, έχει σαν αποτέλεσμα τον εγκλωβισμό του αέρα στους μεγαλύτερους πόρους, κάνοντας μη εφικτή τη ροή του. Ο βαθμός κορεσμού δε, καλείται *insular saturation* (Σχήμα 2.6). Εάν ο αέρας βρίσκεται υπό θετικές πιέσεις απομακρύνεται και έτσι επιτυγχάνεται πλήρης κορεσμός. Υπό κανονικές συνθήκες στην ακόρεστη ζώνη δεν επιτυγχάνεται πλήρης κορεσμός εξαιτίας του εναπομείναντα ή παγιδευμένου αέρα.



**Σχήμα 2.4:** Αναπαράσταση του *pellicular* και του *pendular water*.



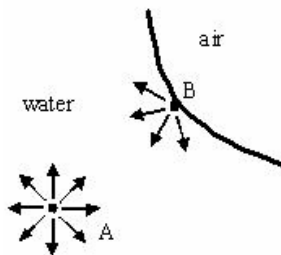
**Σχήμα 2.5:** Αναπαράσταση του *funicular water*.



**Σχήμα 2.6:** Αναπαράσταση *insular saturation*.

Κατά τη θεώρηση της ροής στην ακόρεστη ζώνη, προκύπτουν δύο βασικά ζητήματα, τα οποία σχετίζονται με την παρουσία διαχωριστικής διεπιφάνειας μεταξύ της αέριας και υγρής φάσης, και με την παρουσία της στερεής φάσης. Το πρώτο από αυτά αφορά τη διαβρεχτότητα (*wettability*) του πορώδους μέσου. Στα εδάφη, υπάρχει περισσότερη ενέργεια στη διεπιφάνεια αέρα-στερεού από ότι στη διεπιφάνεια νερού-στερεού. Έτσι, μειώνοντας τη διεπιφάνεια αέρα-στερεού, μειώνεται και η συνολική ενέργεια του συστήματος, και τελικά το στερεό έχει την τάση (προτιμά) να καλύψει την επιφάνειά του με νερό (υδατοδιαβρεχτό). Σ' αυτό το σύστημα, το νερό αποτελεί τη διαβρέχουσα φάση ενώ ο αέρας τη μη διαβρέχουσα, ανάλογα με το είδος του εδάφους. Γενικά, αυτή η κατάσταση θεωρείται ότι ισχύει στα φυσικά εδάφη και αντιστοιχεί στην προηγούμενη περιγραφή της κατανομής του νερού σε ξηρό έδαφος κατά την εισαγωγή του σε αυτό.

Το δεύτερο ζήτημα αφορά τη διαφορά πίεσης εγκάρσια της διεπιφάνειας. Θεωρείται μία διεπιφάνεια που διαχωρίζει την υγρή από την αέρια φάση όπως στο Σχήμα 2.7.



**Σχήμα 2.7:** Διεπιφάνεια που διαχωρίζει την υγρή από την αέρια φάση.

Για ένα μόριο που βρίσκεται στο σημείο  $A$  στο εσωτερικό της μάζας του νερού, οι δυνάμεις που ασκούνται σε αυτό ασκούνται προς όλες τις κατευθύνσεις, ενώ για το μόριο που βρίσκεται στο σημείο  $B$  στη διεπιφάνεια, οι δυνάμεις ασκούνται μόνο προς το εσωτερικό της υγρής φάσης. Για να κινηθεί ένα μόριο από το σημείο  $A$  προς το σημείο  $B$ , πρέπει να σπάσουν οι γειτονικοί δεσμοί και να κινηθεί ενάντια στο δυναμικό πεδίο. Το αποτέλεσμα είναι ότι τα μόρια κοντά στην διεπιφάνεια έχουν περισσότερη ενέργεια από ότι τα μόρια στο εσωτερικό της μάζας του νερού. Η επιπλέον ποσότητα αυτής της επιφανειακής ενέργειας,  $\sigma$ , καλείται επιφανειακή τάση (μετράται σε dynes/cm), και αποτελεί το αίτιο της ανάπτυξης των τριχοειδών πιέσεων.

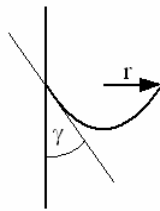
Η τριχοειδής πίεση στην ακόρεστη ζώνη ισούται με τη διαφορά της πίεσης της μη διαβρέχουσας φάσης (αέρας) και της διαβρέχουσας (νερό):

$$p_c = p_a - p_w = \frac{2 \cdot \sigma}{r_c} \quad (2.8)$$

όπου  $p_a$ ,  $p_a$  και  $p_w$  είναι η τριχοειδής πίεση, η πίεση της αέριας φάσης και η πίεση του νερού αντίστοιχα, ενώ  $\sigma$  και  $r_c$  είναι η επιφανειακή τάση και η μέση ακτίνα της καμπύλης διεπιφάνειας. Αν θεωρηθούν οι πόροι σαν μικροί σωληνίσκοι με ακτίνα  $r$ , τότε το νερό εντός αυτών σχηματίζει μια καμπυλότητα μεταξύ της επιφάνειας επαφής νερού-αέρα και η διαφορά πίεσης μεταξύ των δύο αυτών επιφανειών είναι η τριχοειδής πίεση που προαναφέρθηκε. Η σχέση που ισχύει σ' αυτή την περίπτωση είναι:

$$p_c = \frac{2\sigma \cos \gamma}{r} \quad (2.9)$$

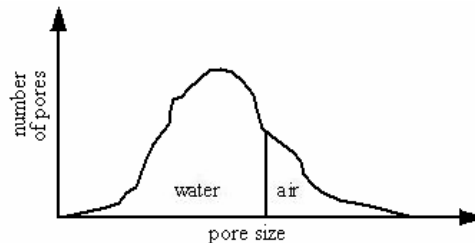
όπου  $\gamma$  η επιφανειακή γωνία μεταξύ των δύο ρευστών (Σχήμα 2.8).



**Σχήμα 2.8:** Πόρος ως μικρός σωληνίσκος.

Από τη σχέση αυτή συμπεραίνεται ότι οι τριχοειδείς πιέσεις αυξάνονται με τη

μείωση της ακτίνας των πόρων λόγω του ότι μειώνεται και η ακτίνα της διεπιφάνειας. Αυτό σημαίνει ότι για υψηλές τιμές τριχοειδών πιέσεων η διεπιφάνεια νερού-αέρα υφίσταται κυρίως στους μικρότερους πόρους. Στο Σχήμα 2.9 παρουσιάζεται ποιοτικά η κατανομή του νερού στους πόρους, ενώ η καμπύλη αντιστοιχεί στο κλάσμα συγκεκριμένου μεγέθους πόρου.



**Σχήμα 2.9:** Κατανομή του νερού στους πόρους.

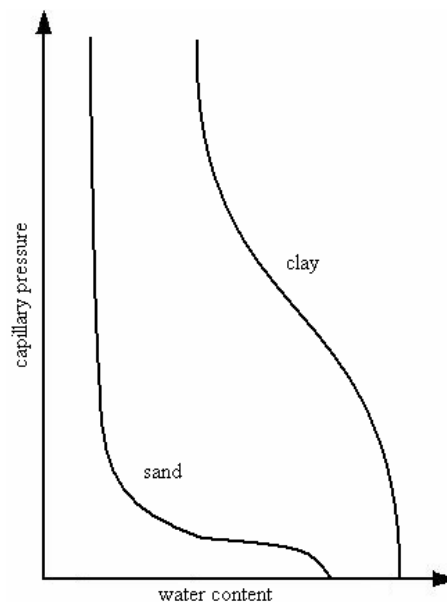
### **2.3.3 Η χαρακτηριστική καμπύλη του εδαφικού νερού**

Η χαρακτηριστική καμπύλη του εδαφικού νερού υποδεικνύει τη σχέση της τριχοειδούς πίεσης με την περιεκτικότητα σε νερό ενός συγκεκριμένου εδάφους. Η κατανομή της αέριας και υγρής φάσης στους πόρους της εδαφικής μάζας (Σχήμα 2.9) αντιστοιχεί σε δεδομένες συνθήκες τριχοειδών πιέσεων. Το ολοκλήρωμα του κλάσματος των πόρων που περιέχουν νερό αντιστοιχεί στο κλάσμα του ολικού πορώδους που περιέχει νερό. Η ποσότητα αυτή αντιστοιχεί στο βαθμό κορεσμού σε νερό ( $S_w$ ) και επομένως η σχέση μεταξύ τριχοειδών πιέσεων και περιεκτικότητας σε νερό (βαθμού κορεσμού) είναι συνάρτηση της κατανομής του μεγέθους των πόρων.

Τυπικές χαρακτηριστικές καμπύλες για αμμώδη και αργιλικά εδάφη φαίνονται στο Σχήμα 2.10 και αντιστοιχούν σε δείγματα που ήταν αρχικά κορεσμένα και έπειτα αποστραγγίστηκαν με αύξηση των τριχοειδών πιέσεων. Παρατηρείται ότι για το αμμώδες έδαφος πραγματοποιείται μια απότομη μείωση της περιεκτικότητας σε νερό με αύξηση της τριχοειδούς πίεσης, λόγω της αλληλουχίας πόρων μεγάλου μεγέθους, σε αντίθεση με το αργιλικό έδαφος που αποτελείται από ένα ευρύ φάσμα μεγέθους πόρων και παρουσιάζει σταδιακή μείωση στην περιεκτικότητά του σε νερό. Σε μεγάλες τιμές τριχοειδών πιέσεων, αύξηση αυτών προκαλεί πολύ μικρή μείωση της περιεκτικότητας σε νερό ώσπου



η τελευταία αποκτῆσει μια τελική τιμή πέρα της οποίας οποιαδήποτε αύξηση των τριχοειδών πιέσεων δεν μπορεί να απομακρύνει επιπλέον ποσότητες νερού των πόρων. Ο βαθμός κορεσμού που αντιστοιχεί σε αυτές τις συνθήκες δεν δύναται να μειωθεί και καλείται *irreducible water saturation*.



**Σχήμα 2.10:** Χαρακτηριστικές καμπύλες εδαφικού νερού για αμμώδη και αργιλικά εδάφη.

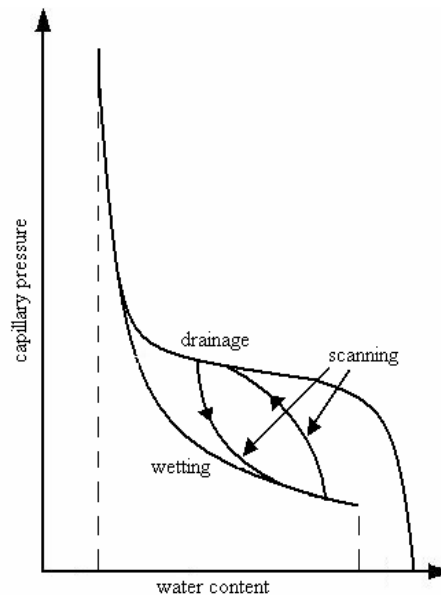
#### 2.3.4 Το φαινόμενο της υστέρησης

Για την πλειοψηφία των εδαφών, η χαρακτηριστική καμπύλη του εδαφικού νερού παρουσιάζει υστέρηση. Αυτό σημαίνει ότι η σχέση μεταξύ της τριχοειδούς πίεσης και της περιεκτικότητας σε νερό εξαρτάται από το ιστορικό κορεσμού αλλά και από την υπάρχουσα περιεκτικότητα σε νερό. Το Σχήμα 2.11 απεικονίζει τη χαρακτηριστική καμπύλη εδαφικού νερού για συνθήκες αποστράγγισης και διαβροχής. Η άνω καμπύλη, η οποία ονομάζεται καμπύλη αποστράγγισης, αντιστοιχεί σε ένα εδαφικό δείγμα που είναι αρχικά κορεσμένο και που αποστραγγίζεται αυξάνοντας τις τριχοειδείς πιέσεις. Η κάτω καμπύλη, που ονομάζεται καμπύλη διαβροχής, αντιστοιχεί σε επαναδιαβροχή του εδάφους. Τελικά, η αέρια φάση εγκλωβίζεται στους μεγαλύτερους πόρους και η διαδικασία διαβροχής διακόπτεται. Από αυτό το σημείο και έπειτα δεν υπάρχει μοναδική συσχέτιση μεταξύ της πίεσης του νερού και της περιεκτικότητας σε αυτό. Αν η

διαδικασία διαβροχής ή αποστράγγισης είχε σταματήσει πριν ο κορεσμός γίνει μέγιστος ή ελάχιστος, και είχε έπειτα αντιστραφεί θα προέκυπταν οι *scanning curves*. Αυτό που στην πραγματικότητα συμβαίνει στο πεδίο κατά τη διάρκεια μιας βροχόπτωσης είναι ότι αρχικά το έδαφος διαβρέχεται ακολουθώντας μια καμπύλη διαβροχής (*wetting scanning curve*) και έπειτα αποστραγγίζεται ακολουθώντας μια αντίστοιχη καμπύλη αποστράγγισης (*drainage scanning curve*). Σε περίπτωση που η διαβροχή ή η αποστράγγιση πραγματοποιείται για μεγάλο χρονικό διάστημα, ο κορεσμός αγγίζει τις κύριες καμπύλες διαβροχής ή αποστράγγισης.

Υπάρχουν δύο κύριοι λόγοι για τους οποίους οι καμπύλες διαβροχής και αποστράγγισης διαφέρουν μεταξύ τους:

1. Ο πρώτος είναι ότι οι εδαφικοί πόροι δεν έχουν ομοιόμορφο μέγεθος και είναι γνωστό ότι πόροι ποικίλων μεγεθών πληρούνται και αποστραγγίζονται με διαφορετικό τρόπο.

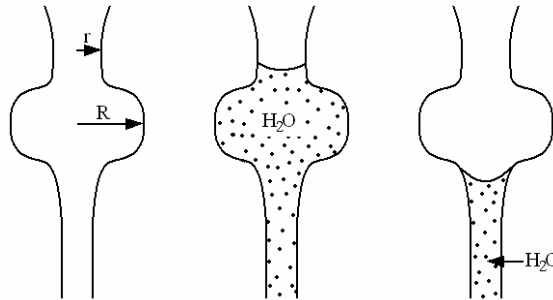


**Σχήμα 2.11:** Χαρακτηριστική καμπύλη εδαφικού νερού για συνθήκες αποστράγγισης και διαβροχής.

Βασικά ο πόρος χαρακτηρίζεται από δύο ακτίνες, την ακτίνα λαιμού  $r$  και τη μέγιστη ακτίνα  $R$ , Σχήμα 2.12. Η πίεση δίνεται από τη σχέση

$\psi_r = \frac{\partial \sigma \cos \gamma}{r}$ . Ο πόρος αποξηραίνεται όταν εφαρμοστεί πίεση  $\psi$  που είναι περισσότερο αρνητική από την  $\psi_r$  και διαβρέχεται όταν αυτή είναι λιγότερη αρνητική του  $\psi_r$ . Λόγω του ότι  $R > r$  και συνεπώς  $\psi_r > \psi_R$  κατά τη διαβροχή απαιτείται λιγότερη αρνητική πίεση από ότι στην αποξήρανση.

2. Ο δεύτερος λόγος έχει να κάνει με το ότι όταν ένα ακόρεστο έδαφος διαβρεχτεί, αναπόφευκτα φυσαλίδες αέρα εγκλωβίζονται στους πόρους του εδάφους με αποτέλεσμα η περιεκτικότητα σε νερό να είναι μικρότερη του συνολικού πορώδους.



**Σχήμα 2.12:** Προσεγγιστική μορφή πόρου.

### 2.3.5 Εξισώσεις ροής στην ακόρεστη ζώνη

Παρόλο που αυτό δεν είναι πάντοτε σωστό (ειδικά σε περιοχές όπου η επιφάνεια του εδάφους έχει κάποια κλίση), θεωρείται ότι η ροή και η μεταφορά μάζας στην ακόρεστη ζώνη στο πεδίο και σε μεγάλη κλίμακα γίνεται μονοδιάστατα κατά την κατακόρυφη διάσταση (Mohanty and van Genuchten, 1996). Εκτελώντας το μονοδιάστατο μοντέλο σε διάφορες θέσεις μπορεί να προσδιοριστεί η διαφοροποίηση των μετεωρολογικών συνθηκών, των εδαφικών ιδιοτήτων και των συνθηκών αποστράγγισης καθώς και το τοπικό ισοζύγιο νερού και ρύπου στην οριζόντια διεύθυνση (van Dam and Feddes, 2000).

Η εξίσωση ροής Richards σε μέσα με ποικίλο βαθμό κορεσμού και η εξίσωση διάχυσης-διασποράς για τη μεταφορά του ρύπου επιλύονται με αρχικές και συνοριακές συνθήκες που ορίζονται από το χρήστη. Το πρόβλημα ροής του ύδατος πρέπει να συμπεριλαμβάνει την επίδραση της ζώνης των ριζών και την υστέρηση στις υδραυλικές ιδιότητες του εδάφους ενώ η εξίσωση μεταφοράς

ρύπου συμπεριλαμβάνει τις διαδικασίες ιονικής και μοριακής διάχυσης, υδροδυναμικής διασποράς, γραμμικής και μη γραμμικής προσρόφησης και αποσάθρωσης πρώτης τάξης (Mohanty and van Genuchten, 1996).

Υπενθυμίζεται ότι το βασικό μέγεθος σε σχέση με το νερό σε ένα μη κορεσμένο μέσο είναι η περιεχόμενη υγρασία ή αλλιώς διαβρεχτότητα (κοινώς συμβολίζεται με  $\theta$ ) και ορίζεται ως ο όγκος του νερού προς τον όγκο του μέσου. Το ύδωρ σε ακόρεστα μέσα συγκρατείται μέσω δυνάμεων η επίδραση των οποίων εκφράζεται με όρους ενεργειακής κατάστασης ή πίεσης του νερού (USGS, 2006a).

Όπως προαναφέρθηκε, η τριχοειδής πίεση (κοινώς συμβολίζεται με  $\psi$ ) είναι η πίεση του νερού σε έναν πόρο του μέσου σε σχέση με την πίεση του αέρα. Όταν το μέσο είναι μη κορεσμένο, το νερό έχει γενικά χαμηλότερη πίεση από τον αέρα και έτσι οι τριχοειδείς πιέσεις είναι αρνητικές. Υψηλές τριχοειδείς πιέσεις συνεπάγονται μικρή περιεκτικότητα σε νερό, ενώ όσο η τριχοειδής πίεση μειώνεται, η περιεκτικότητα σε νερό αυξάνεται με μη γραμμικό τρόπο. Ο συσχετισμός μεταξύ της τριχοειδούς πίεσης και της περιεκτικότητας σε νερό ονομάζεται καμπύλη συγκράτησης και είναι χαρακτηριστική για το πορώδες μέσο, ενώ εξαρτάται από τη φύση των πόρων αυτού. Αυτή η σχέση επηρεάζει κατά πολύ την κίνηση του νερού και άλλων ουσιών σε ακόρεστα μέσα (USGS, 2006a).

Για πορώδη μέσα διαφόρων βαθμών κορεσμού, η κύρια εξίσωση για μονοδιάστατη κατακόρυφη ροή, υποδεικνύει τη σύνθετη και μη γραμμική φύση της ροής στην ακόρεστη ζώνη (Mohanty and van Genuchten, 1996):

$$L_w(h) \equiv \frac{\partial}{\partial x} \left( K \frac{\partial h}{\partial x} - C \right) - C \frac{\partial h}{\partial t} = 0 \quad (2.10)$$

Η σταθερά  $C$  στην παραπάνω εξίσωση δίνεται από τον τύπο:

$$C = \frac{\theta}{\varepsilon} S_s + \varepsilon \frac{\partial S_w}{\partial h} \quad (2.11)$$

όπου:

$\theta$ : η ογκομετρική περιεκτικότητα υγρασίας,

$\varepsilon$ : το πορώδες,

$S_s$ : συντελεστής ειδικής αποθηκευτικότητας,

$S_w$ : ο βαθμός κορεσμού σε ρευστό.

Ο δεύτερος όρος στο δεξί μέρος της εξίσωσης (2.11) είναι ίσος με το μηδέν για την περίπτωση ενός πλήρως κορεσμένου μέσου. Ο όρος που περιέχει το  $S_s$  από την άλλη, μπορεί να αγνοηθεί όταν υπάρχει μόνο μια μη κορεσμένη ζώνη. Στην περίπτωση αυτή ο συντελεστής  $C$  μπορεί να προσεγγιστεί από την κλίση της καμπύλης συγκράτησης της εδαφικής υγρασίας,  $\theta(h)$ :

$$C \approx \frac{\partial \theta}{\partial h} \quad (2.12)$$

### 2.3.6 Εξισώσεις μεταφοράς ρύπου στην ακόρεστη ζώνη

Η μεταφορά ενός διαλυμένου ρύπου στην ακόρεστη ζώνη μπορεί να περιγραφεί από την εξίσωση διασποράς-διάχυσης (Mohanty and van Genuchten, 1996):

$$L_s(C) \equiv \frac{\partial}{\partial x} \left( \theta D \frac{\partial C}{\partial x} - qC \right) - \frac{\partial}{\partial t} (\theta C + \rho S) = 0 \quad (2.13)$$

όπου:

$\theta$ : η ογκομετρική περιεκτικότητα υγρασίας,

$C$ : η περιεκτικότητα του διαλύματος,

$D$ : ο συντελεστής υδροδυναμικής διασποράς,

$S$ : η συγκέντρωση που έχει απορροφηθεί,

$q$ : η ογκομετρική ροή μάζας,

$\rho$ : η ογκομετρική πυκνότητα.

Η επίλυση της εξίσωσης (2.13) απαιτεί τη γνώση των  $\theta$  και  $q$ . Το  $\theta$  θεωρείται ότι αποτελεί μοναδική συνάρτηση του  $h$  και μπορεί να προκύψει από επιλύσεις της εξίσωσης (2.12). Επίσης το  $q$  προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης (2.14) με τη χρήση του νόμου του Darcy, ως ακολούθως:

$$q = -K(\theta) \frac{\partial h}{\partial x} + K(\theta) \quad (2.14)$$

Ο συντελεστής διασποράς ( $D$ ) αντιστοιχεί στη μοριακή διάχυση αλλά και τη μηχανική διασπορά και θεωρείται ότι ορίζεται ικανοποιητικά από την εξίσωση:

$$D = D_0 \tau + \lambda |u| \quad (2.15)$$

όπου:

$D_0$ : ο συντελεστής μοριακής διάχυσης,

$\tau$ : παράγοντας σκολιότητας,

$\lambda$ : η ικανότητα διασποράς,

$u$ : η μέση ταχύτητα του νερού των πόρων:  $u=q/\theta$ .

Η επίλυση της εξίσωσης (2.13) απαιτεί επίσης μια έκφραση που να συνδέει την απορροφημένη συγκέντρωση ( $S$ ) με τη συγκέντρωση του διαλύματος ( $C$ ). Θεωρείται ότι η απορροφημένη συγκέντρωση και η συγκέντρωση του διαλύματος βρίσκονται συνεχώς σε τοπική ισορροπία και ότι η ισόθερμη της απορρόφησης δίνεται από την εξίσωση του Freundlich (Mohanty and van Genuchten, 1996):

$$S = kC^\eta \quad (2.16)$$

όπου  $k$  και  $\eta$  είναι εμπειρικοί συντελεστές κατανομής. Αντικαθιστώντας την εξίσωση (2.16) στην εξίσωση (2.13), και για την περίπτωση που  $n=1$  προκύπτει η μορφή της εξίσωσης μεταφοράς μάζας:

$$L_s(C) \equiv \frac{\partial}{\partial x} \left( \theta D \frac{\partial C}{\partial x} - qC \right) - \frac{\partial}{\partial t} (\theta RC) = 0 \quad (2.17)$$

όπου ο παράγοντας επιβράδυνσης  $R$  ορίζεται ως:

$$R = 1 + \frac{\rho k}{\theta} \quad (2.18)$$

Η εξίσωση μεταφοράς ρύπου, ομοίως με αυτή της ροής, επιλύεται με ορισμό των κατάλληλων αρχικών και συνοριακών συνθηκών διακριτοποιώντας το εδαφικό προφίλ σε έναν αριθμό σταθερού ή ποικίλου μεγέθους στοιχείων. Λόγω του ότι η υδραυλική αγωγιμότητα  $K$  και η περιεκτικότητα σε εδαφικό νερό  $C$  είναι μη γραμμικές συναρτήσεις του υδραυλικού ύψους  $h$ , απαιτείται μια επαναληπτική διαδικασία (για περιπτώσεις 2D και 3D προσομοιώσεις) για κάθε χρονικό βήμα προκειμένου να προκύψει η τελική λύση των εξισώσεων ροής και μεταφοράς ρύπου. Η επιτυχία ενός αριθμητικού μοντέλου εξαρτάται από τη διαθεσιμότητα και την ακρίβεια των εισαγόμενων παραμέτρων (Mohanty and van Genuchten, 1996).

### **2.3.7 Προσδιορισμός των ιδιοτήτων εδάφους**

Η ανάλυση των περισσότερων προβλημάτων που αφορά τον υπολογισμό της ροής και την συμμεταφορά ρυπαντή στο έδαφος, βασίζεται στην κατανόηση των ροών μάζας του νερού. Επειδή δεν είναι δυνατός ο ακριβής υπολογισμός της ροής, συνήθως οι προσπάθειες κατευθύνονται προς τον υπολογισμό του ισοζυγίου μάζας και την τάση μετακίνησης του ρυπαντή. Η ακρίβεια των μοντέλων πρόβλεψης επιτυγχάνεται με τον προσδιορισμό της στρωματογραφίας και την ακριβή περιγραφή των ιδιοτήτων των υποκείμενων εδαφών.

Προκειμένου να εξακριβωθούν οι ιδιότητες του υποκείμενου εδάφους, πρέπει να ορισθούν δύο σημαντικές σχέσεις: η χαρακτηριστική καμπύλη εδαφικού νερού και η σχέση μεταξύ της υδραυλικής αγωγιμότητας με είτε το υδραυλικό ύψος είτε την περιεκτικότητα σε νερό. Η υδραυλική αγωγιμότητα στις συνθήκες κορεσμού συχνά εκτιμάται ανεξάρτητα από τις άλλες παραμέτρους.

#### *2.3.7.1 Υπολογισμός χαρακτηριστικής καμπύλης εδαφικού νερού*

Για τον προσδιορισμό της χαρακτηριστικής καμπύλης υγρασίας για συγκεκριμένο έδαφος, υπάρχουν τρεις προσεγγίσεις. Η πρώτη τεχνική αφορά την εκτίμηση της καμπύλης από βιβλιογραφία για παρόμοια είδη εδαφών. Η δεύτερη, και πιθανόν η πιο κοινή τεχνική, αφορά τη θεώρηση μίας αναλυτικής συνάρτησης  $\Psi(\theta_w)$ . Η ύπαρξη πολλών δεδομένων πεδίου και η εφαρμογή τους στα μοντέλα, αποτελεί σημαντικό πλεονέκτημα. Η απευθείας μέτρηση αποτελεί την τρίτη τεχνική. Πολλές τέτοιες μέθοδοι έχουν εφαρμοστεί, χωρίζονται όμως σε δύο κατηγορίες: στη μέθοδο αυξητικής ισορροπίας και στη δυναμική μέθοδο. Στην πρώτη, το έδαφος έρχεται σε ισορροπία σε συγκεκριμένη υγρασία  $\theta_w$  και υπολογίζεται το δυναμικό  $\Psi$ . Η ίδια διαδικασία επαναλαμβάνεται έως ότου συγκεντρωθεί ικανοποιητικός αριθμός ζευγών  $\theta_w$ - $\Psi$  που θα παράξουν την καμπύλη υγρασίας. Στη δυναμική μέθοδο η περιεχόμενη υγρασία πρέπει να υπολογιστεί με μη καταστροφικές μεθόδους (όπως είναι για παράδειγμα οι πυρηνικές μέθοδοι). Το δυναμικό πίεσης μετράται με όργανα που έχουν γρήγορη χρονική απόκριση δεδομένου ότι αυτό μεταβάλλεται συνεχώς.

#### Το μοντέλο των Brooks και Corey

Οι Brooks και Corey (1964) διατύπωσαν ένα αναλυτικό μοντέλο το οποίο

σχετίζεται με την επίδραση του μειούμενου βαθμού κορεσμού,  $\theta$ , με το ύψος των τριχοειδών πιέσεων,  $\psi$  (*capillary pressure*). Η μαθηματική έκφραση είναι:

$$\theta = 1 \text{ για } \psi \leq \psi_b, \text{ και } \theta = \left( \frac{\psi_b}{\psi} \right)^\lambda \text{ για } \psi > \psi_b \quad (2.19)$$

όπου ο μειούμενος βαθμός κορεσμού ορίζεται ως:

$$\theta = \frac{\theta_w - \theta_{wr}}{n - \theta_{wr}} = \frac{\theta_w / n - \theta_{wr} / n}{n / n - \theta_{wr} / n} = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \quad (2.20)$$

Οι παράμετροι  $\theta_{wr}$  και  $S_{wr}$  είναι οι μη επιπλέον μειούμενοι βαθμοί περιεχόμενου νερού και κορεσμού αντίστοιχα. Η παράμετρος  $\psi_b$  είναι το ύψος πίεσης λόγω τριχοειδών φαινομένων και αντιστοιχεί σε τιμή περιεκτικότητας  $\theta_s$  κατάστασης κορεσμού, ενώ το  $\lambda$  αφορά την κατανομή του μεγέθους πόρων. Όταν το  $\lambda$  λαμβάνει μικρές τιμές το εύρος του μεγέθους πόρων είναι μεγάλο ενώ αντίστοιχα όταν το  $\lambda$  λαμβάνει μεγάλες τιμές το εύρος του μεγέθους πόρων είναι μικρό.

Η μαθηματική διατύπωση της παραπάνω έκφρασης μπορεί εναλλακτικά να περιγραφεί από τη σχέση της περιεκτικότητας του ύδατος  $\theta$  σε σχέση με το ύψος των τριχοειδών πιέσεων  $\psi$ :

$$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) \left( \frac{\psi}{\psi_b} \right)^{-\lambda} \quad (2.21)$$

όπου  $\theta_r$  είναι η ελάχιστη τιμή περιεκτικότητας ύδατος.

Ο βαθμός κορεσμού σε αυτήν την περίπτωση είναι:

$$S_e = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \quad (2.22)$$

#### Το μοντέλο του van Genuchten

Εναλλακτικά η περιεκτικότητα του ύδατος  $\theta$  σε σχέση με το ύψος των τριχοειδών πιέσεων  $\psi$  δίνεται από τη σχέση του van Genuchten (1980):

$$\theta = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{\left[ 1 + (a|\psi|^n) \right]^m} \quad (2.23)$$



$$\text{όπου } n = \frac{1}{1-m}, \quad a = \frac{1}{\psi_b} (2^{1/m} - 1)^{1-m}$$

και  $m$  είναι παράμετρος που εκτιμάται από την καμπύλη εδάφους-ύδατος.

#### 2.3.7.2 Η υδραυλική αγωγιμότητα

Η υδραυλική αγωγιμότητα μεταβάλλεται ανάλογα με το περιεχόμενο του εδάφους σε υγρασία (σε γενικές γραμμές όσο αυξάνεται η υγρασία, αυξάνεται η υδραυλική αγωγιμότητα), ενώ ακόμη εξαρτάται από το δυναμικό των τριχοειδών φαινομένων (*matric potential*),  $\psi_m$ , και μπορεί να εκφραστεί ως συνάρτηση αυτού στο νόμο του Darcy. Παρόλα αυτά δεν συνηθίζεται λόγω δυσκολίας προσδιορισμού του  $\psi_m$ , που οφείλεται κυρίως στο φαινόμενο της υστέρησης. Για τον προσδιορισμό τόσο του  $K(\theta)$  όσο και του  $K(\psi_m)$  έχουν αναπτυχθεί πολλοί εμπειρικοί τύποι, βασισμένοι σε διαφορετικές παραδοχές.

Ο van Genuchten διατύπωσε δύο μαθηματικές εκφράσεις βάσει των οποίων μπορεί να υπολογιστεί η ακόρεστη υδραυλική αγωγιμότητα τόσο σαν συνάρτηση της περιεκτικότητας του εδάφους σε νερό ( $\theta$ ), όσο και σαν συνάρτηση του πιεζομετρικού ύψους  $h$ .

$$K(\theta) = K_s S_e^{1/2} \left[ 1 - (1 - S_e^{1/m})^m \right]^2 \quad (2.24)$$

όπου:

$$S_e: (\theta - \theta_r) / (\theta_s - \theta_r),$$

$K(\theta)$ : ακόρεστη υδραυλική αγωγιμότητα σε περιεκτικότητα ύδατος  $\theta$ ,

$K_s$ : κεκορεσμένη υδραυλική αγωγιμότητα,

$m$ : van Genuchten εδαφική παράμετρος.

$$K(h) = K_s \frac{\left\{ 1 - (ah)^{n-1} [1 + ah^n]^{-m} \right\}^2}{[1 + (ah)^n]^{m/2}} \quad (2.25)$$

όπου:

$K(h)$ : ακόρεστη υδραυλική αγωγιμότητα σε πιεζομετρικό ύψος  $h$ ,

$h$ : πιεζομετρικό ύψος,

$m$ : van Genuchten εδαφική παράμετρος,

$n$ : van Genuchten εδαφική παράμετρος,

$\alpha$ : van Genuchten εδαφική παράμετρος.

Επικρατέστερη όλων παρουσιάζεται να είναι η σχέση 2.26, η οποία προσδιορίζει την υδραυλική αγωγιμότητα  $K(\theta)$  συναρτήσει της υδραυλικής αγωγιμότητας κορεσμένου εδάφους  $K_s$ , του υδατικού περιεχόμενου κορεσμένου εδάφους  $\theta_s$ , του εναπομένου υδατικού περιεχόμενου  $\theta_r$  και μιας μεταβλητής  $n$ , η οποία εξαρτάται από τον τύπο του εδάφους και λαμβάνει τιμές 1 με 2 για αργιλικά εδάφη και μέχρι 4 ή και μεγαλύτερη για χονδρόκοκκα εδάφη.

$$K(\theta) = K_s \left( \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^n \quad (2.26)$$

Μερικοί σημαντικοί παράγοντες που επηρεάζουν την υδραυλική αγωγιμότητα σε ακόρεστα εδάφη είναι:

- Η υδραυλική κλίση  $i$ , που αλλάζει συνεχώς ανάλογα με την περιεχόμενη υγρασία στο έδαφος.
- Το *matric potential*,  $\Psi_m$ , που επηρεάζεται άμεσα από την ποσότητα νερού που περιέχεται στο έδαφος.
- Ύπαρξη διαφόρων στρωμάτων με διαφορετική κοκκομετρία και υγρασία.

Χαρακτηριστικά, όσον αφορά στην κοκκομετρία του εδάφους, έχει παρατηρηθεί ότι σε λεπτόκοκκα εδάφη, αύξηση του δυναμικού λόγω τριχοειδών φαινομένων συνεπάγεται αύξηση της υδραυλικής αγωγιμότητας, ενώ αντίθετα σε χονδρόκοκκα εδάφη, όσο αυξάνεται το δυναμικό λόγω τριχοειδών φαινομένων η υδραυλική αγωγιμότητα μειώνεται.

Άλλοι παράγοντες που μπορούν να προκαλέσουν μείωση στην υδραυλική αγωγιμότητα λόγω αύξησης του δυναμικού αναρρόφησης είναι:

- Μείωση της αγωγιμότητας των πόρων λόγω απώλειας ύδατος από μεγαλύτερους πόρους.
- Μείωση του ενεργού πορώδους.
- Μη ευθύγραμμη κίνηση του ύδατος μεταξύ των πόρων.
- Μεγάλο ιξώδες.

- Θερμοκρασία (ανάλογα με το υπάρχον ύδωρ, γενικά αυξάνει την υδραυλική αγωγιμότητα).

## 2.4 Κορεσμένη ζώνη

### 2.4.1 Γενικά

Η ακόρεστη ζώνη, εκτός από τα επιφανειακά ύδατα που συνδέονται άμεσα με την κορεσμένη ζώνη, είναι αυτή που τροφοδοτεί την κορεσμένη ζώνη με όγκους ύδατος, πολλές φορές ρυπασμένους από την ανθρώπινη δραστηριότητα. Δεδομένου αυτού του γεγονότος, οι τιμές των παροχών και συγκεντρώσεων του κατώτερου συνόρου της ακόρεστης ζώνης σε κάθε χρονικό βήμα προσομοίωσης ενός συστήματος μελέτης, αποτελούν τις συνοριακές συνθήκες του ανώτερου ορίου της κορεσμένης ζώνης. Ο προσδιορισμός της ροής και της μεταφοράς ρύπου στην κορεσμένη ζώνη γίνεται δια μέσου των εξισώσεων ισοζυγίου μάζας και του νόμου του Darcy όπως και στην ακόρεστη. Η διαφορά έγκειται στο ότι στην κορεσμένη ζώνη οι εδαφικοί πόροι είναι πληρωμένοι με νερό, και επομένως η υδραυλική αγωγιμότητα λαμβάνει τη μέγιστη δυνατή τιμή. Στις ενότητες που ακολουθούν περιγράφονται οι κύριες εξισώσεις που λαμβάνουν χώρα στην κορεσμένη ζώνη.

### 2.4.2 Νόμος του Darcy

Ο Darcy μελέτησε τη ροή του ύδατος διαμέσου οριζόντιων στρωμάτων άμμου (που χρησιμοποιούνται συνήθως στα υδατικά φίλτρα) και συμπέρανε ότι ο ρυθμός ροής διαμέσου πορώδους υλικού είναι ανάλογος των απωλειών φορτίου και ενός συντελεστή  $K$  που χαρακτηρίζει το πορώδες υλικό, ενώ είναι αντιστρόφως ανάλογος του μήκους πορείας της ροής. Η διατύπωση αυτή αποτελεί το νόμο του Darcy, που εκφράζεται από τη σχέση:

$$\frac{Q}{A} = -K \frac{\Delta h}{L} \quad \text{ή} \quad q = -K \frac{\Delta h}{L} \quad (2.27)$$

όπου:

$Q$ : η παροχή ( $L^3/T$ ),

$A$ : η επιφάνεια ( $L^2$ ),

$K$ : η υδραυλική αγωγιμότητα ( $L/T$ ),

$\Delta h$ : η απώλεια φορτίου που εκφράζεται ως  $(p_1/g+z_1)-(p_2/g+z_2)$  (L),

$L$ : το μήκος της στήλης (L),

$q$ : η ταχύτητα του Darcy ή ειδική παροχή (L/T).

Το αρνητικό πρόσημο δείχνει ότι η διεύθυνση της ταχύτητας ροής είναι προς το μέρος όπου ελαττώνεται το φορτίο. Το  $\Delta h/L$  συνήθως εμφανίζεται στη γενική του μορφή ως  $\Delta h/dl$  και ονομάζεται υδραυλική κλίση (Καρατζάς, 2004).

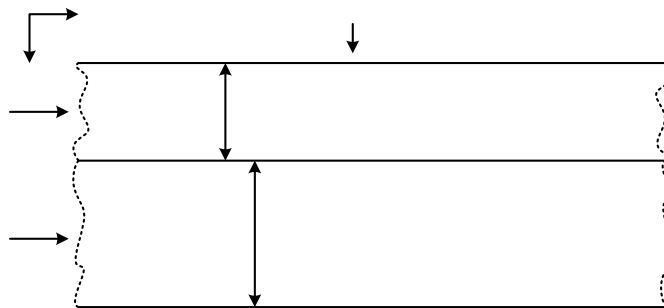
Εξ' ορισμού, η ταχύτητα του Darcy θεωρεί ότι η ροή πραγματοποιείται διαμέσου της συνολικής επιφάνειας, χωρίς να λαμβάνεται υπόψη ότι σε πορώδες υλικό η ροή περιορίζεται μόνο εντός του χώρου των πόρων. Σε αυτή την περίπτωση η πραγματική ταχύτητα ροής εκφράζεται από τη σχέση:

$$q_p = \frac{Q}{nA} = \frac{q}{n} = \frac{K}{n} \frac{dh}{dl} \quad (2.28)$$

όπου:

$n$ : το πορώδες του εδαφικού υλικού.

Στην περίπτωση που ο υδροφορέας αποτελείται από παραπάνω του ενός οριζόντια εδαφικά στρώματα με διαφορετικό πάχος ( $z$ ) και υδραυλική αγωγιμότητα ( $K$ ), ανάλογα με τη διεύθυνση της ροής υπολογίζεται η υδραυλική αγωγιμότητα ολόκληρου του συστήματος (Σχήμα 2.13). Το φαινόμενο αυτό ισχύει και στην ακόρεστη ζώνη.



**Σχήμα 2.13:** Διαγραμματική αναπαράσταση δύο ισοτρόπων οριζοντίων στρωμάτων με διαφορετικό πάχος  $z$  και υδραυλική αγωγιμότητα  $K$ .

### 1. Οριζόντια ροή

Ο όρος  $dh/dx$  παραμένει σταθερός για όλα τα στρώματα. Άρα, στην περίπτωση

των δύο στρωμάτων ο ολικός ρυθμός ροής ανά μονάδα πλάτους θα δίνεται από τη σχέση:

$$q_x = q_1 + q_2 = \frac{dh}{dx}(K_1 z_1 + K_2 z_2) \quad (2.29)$$

όπου:

$q_1, q_2$ : οι επιμέρους ρυθμοί ροής για τα δύο εδαφικά στρώματα,

$K_1, K_2$ : οι υδραυλικές αγωγιμότητες των δύο εδαφικών στρωμάτων,

$z_1, z_2$ : τα πάχη των δύο στρωμάτων.

Αν θεωρηθεί ότι τα δύο στρώματα αποτελούν ένα ομοιογενές σύστημα με μια τιμή οριζόντιας υδραυλικής αγωγιμότητας ολόκληρου του συστήματος  $K_x$ , ο ρυθμός ροής  $q_x$  θα δίνεται από τη σχέση:

$$q_x = K_x \frac{dh}{dx}(z_1 + z_2) \quad (2.30)$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις (2.29) και (2.30), προκύπτει ότι:

$$K_x = \frac{K_1 z_1 + K_2 z_2}{z_1 + z_2} \quad (2.31)$$

που στην περίπτωση των  $n$  εδαφικών στρωμάτων γίνεται:

$$K_x = \frac{K_1 z_1 + K_2 z_2 + \dots + K_n z_n}{z_1 + z_2 + \dots + z_n} \quad (2.32)$$

## 2. Κατακόρυφη ροή

Κατά την κατακόρυφη ροή, ο όρος  $q_z$  παραμένει σταθερός για όλα τα στρώματα. Άρα, στην περίπτωση των δύο στρωμάτων η ολική απώλεια φορτίου θα δίνεται από τη σχέση:

$$dh_1 + dh_2 = \left[ \frac{z_1}{K_1} + \frac{z_2}{K_2} \right] q_z \quad (2.33)$$

όπου:

$dh_1, dh_2$ : οι επιμέρους απώλειες φορτίου για τα δύο εδαφικά στρώματα,

$K_1, K_2$ : οι υδραυλικές αγωγιμότητες των δύο εδαφικών στρωμάτων,

$z_1, z_2$ : τα πάχη των δύο στρωμάτων.

Αν θεωρηθεί ότι τα δύο στρώματα αποτελούν ένα ομοιογενές σύστημα με μια τιμή οριζόντιας υδραυλικής αγωγιμότητας ολόκληρου του συστήματος  $K_z$ , ο

ρυθμός ροής  $q_z$  ανά μονάδα επιφάνειας θα δίνεται από τη σχέση:

$$q_z = K_z \left[ \frac{dh_1 + dh_2}{z_1 + z_2} \right] \quad \text{ή} \quad dh_1 + dh_2 = \left[ \frac{z_1 + z_2}{K_z} \right] q_z \quad (2.34)$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις (2.33) και (2.34), προκύπτει ότι:

$$K_z = \frac{\frac{z_1 + z_2}{K_1 + K_2}}{\frac{z_1}{K_1} + \frac{z_2}{K_2}} \quad (2.35)$$

που στην περίπτωση των  $n$  εδαφικών στρωμάτων γίνεται:

$$K_z = \frac{\frac{z_1 + z_2 + \dots + z_n}{K_1 + K_2 + \dots + K_n}}{\frac{z_1}{K_1} + \frac{z_2}{K_2} + \dots + \frac{z_n}{K_n}} \quad (2.36)$$

### 2.4.3 Εξισώσεις ροής στην κορεσμένη ζώνη

Τα χαρακτηριστικά της ροής ενός συστήματος υπόγειων υδάτων σε τρεις διαστάσεις προσδιορίζονται μέσω του ισοζυγίου μάζας για ένα στοιχειώδη όγκο:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) - S \frac{\partial h}{\partial t} + Q = 0 \quad (2.37)$$

όπου:

$h$ : το υδραυλικό ύψος (L),

$K_{xx}$ : η υδραυλική αγωγιμότητα στην  $x$  κατεύθυνση (L/T),

$K_{yy}$ : η υδραυλική αγωγιμότητα στην  $y$  κατεύθυνση (L/T),

$K_{zz}$ : η υδραυλική αγωγιμότητα στην  $z$  κατεύθυνση (L/T),

$S$ : ο συντελεστής ειδικής αποθηκευτικότητας (L/T),

$Q$ : ο όρος της άντλησης/καταβύθισης στην περιοχή I (L<sup>3</sup>/T).

Αν η προσομοίωση ενός φυσικού συστήματος γίνεται σε μία διάσταση τότε η παραπάνω εξίσωση απλοποιείται στην μορφή:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) - S \frac{\partial h}{\partial t} + Q = 0 \quad (2.38)$$

### 2.4.4 Εξισώσεις μεταφοράς ρύπου στην κορεσμένη ζώνη

Η μεταφορά του ρύπου στην κορεσμένη ζώνη οφείλεται στους μηχανισμούς της διάχυσης, της διασποράς και της συμμεταφοράς. Ο καθένας από τους

μηχανισμούς αυτούς περιγράφεται παρακάτω, ενώ δίνεται και η συγκεντρωτική εξίσωση που περιλαμβάνει και τους τρεις μηχανισμούς.

#### 2.4.4.1 Μεταφορά λόγω διαφοράς συγκέντρωσης

Μια διαλυμένη ουσία στο νερό κινείται από περιοχές υψηλής συγκέντρωσης, σε άλλες με χαμηλότερη συγκέντρωση. Το φαινόμενο αυτό είναι γνωστό ως «μοριακή διάχυση» ή απλά «διάχυση», και συμβαίνει όσο υπάρχει διαφορά στη συγκέντρωση, ακόμη και αν το νερό δεν κινείται. Η μάζα του νερού που διαχύνεται είναι ανάλογη της διαφοράς (κλίσης) των συγκεντρώσεων και εκφράζεται από τον πρώτο νόμο του Fick (Καρατζάς, 2004):

$$F = -D_d \left( \frac{dC}{dx} \right) \quad (2.39)$$

όπου:

$F$ : ροή μάζας της διαλυμένης ουσίας ανά μονάδα επιφάνειας και ανά μονάδα χρόνου,

$D_d$ : σταθερά της διάχυσης ( $L^2/T$ ),

$C$ : συγκέντρωση της διαλυμένης ουσίας ( $M/L^3$ ),

$\frac{dC}{dx}$ : μεταβολή της συγκέντρωσης ( $M/L^3$ ).

Το αρνητικό πρόσημο στην εξίσωση δηλώνει την κατεύθυνση ροής, την κίνηση δηλαδή από περιοχές μεγάλης συγκέντρωσης προς περιοχές μικρότερης συγκέντρωσης. Η σταθερά διάχυσης για διάφορα ιόντα στο νερό  $D_d$ , δεν ποικίλει ιδιαίτερα με τη συγκέντρωση αλλά εξαρτάται από τη θερμοκρασία (Καρατζάς, 2004).

Σε ένα σύστημα όπου η συγκέντρωση μεταβάλλεται με το χρόνο, εφαρμόζεται ο δεύτερος νόμος του Fick, που εκφράζεται από τη σχέση:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_d \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.40)$$

όπου:

$\frac{\partial C}{\partial t}$ : αλλαγή της συγκέντρωσης με το χρόνο ( $M/L^3/T$ ).

Σε πορώδη υλικά η διάχυση δεν προχωράει τόσο γρήγορα όσο στο νερό,

δεδομένου ότι τα ιόντα εξαναγκάζονται σε μεγαλύτερες διαδρομές, προκειμένου να κινηθούν γύρω από τους κόκκους. Σε αυτή την περίπτωση χρησιμοποιείται η πραγματική σταθερά διάχυσης  $D^*$  (*effective diffusion coefficient*):

$$D^* = \omega \cdot D \quad (2.41)$$

όπου  $\omega$  είναι μια σταθερά που σχετίζεται με τη στροφή ή την ελικοειδή κίνηση (στρεβλότητα, tortuosity). Η στρεβλότητα  $T$  είναι ένας παράγοντας εξαρτώμενος από το σχήμα της γραμμής ροής που ακολουθούν τα μόρια του νερού στα πορώδη υλικά. Εάν  $L$  είναι σε ευθεία γραμμή η απόσταση μεταξύ των άκρων μιας καμπύλης γραμμής ροής  $L_e$ , η στρεβλότητα  $T$  ορίζεται ως  $T=L_e/L$ . Η στρεβλότητα σε πορώδη υλικά είναι πάντοτε μεγαλύτερη του 1 διότι η γραμμή ροής που τα μόρια του νερού ακολουθούν παρεκκλίνει γύρω από τα στερεά μόρια (Καρατζάς, 2004).

#### 2.4.4.2 Συμμεταφορά

Κατά τη διαδικασία ροής των υπόγειων υδάτων μεταφέρονται και διαλυμένες ουσίες. Η διαδικασία αυτή ονομάζεται «*συμμεταφορά*» (*advection*). Η ποσότητα της ουσίας που μεταφέρεται είναι συνάρτηση της συγκέντρωσής της στα υπόγεια ύδατα και της ποσότητας του νερού της υπόγειας ροής. Για μονοδιάστατη ροή σε μια κατά πλάτος τομή του πορώδους υλικού, η ποσότητα του νερού της υπόγειας ροής είναι ίση με τη μέση γραμμική ταχύτητα πολλαπλασιασμένη με το ενεργό πορώδες (Καρατζάς, 2004).

Η τιμή της ροής του νερού σε κατά πλάτος τομή ενός πορώδους υλικού είναι η μέση γραμμική ταχύτητα  $v_x$  (average linear velocity). Η μέση γραμμική ταχύτητα δεν αποτελεί τη μέση τιμή της ταχύτητας στην οποία τα μόρια του νερού κινούνται κατά μήκος των γραμμών ροής, η οποία είναι μεγαλύτερη από τη μέση γραμμική ταχύτητα που οφείλεται στη στρεβλότητα (Καρατζάς, 2004).

$$v_x = \frac{K}{n_e} \frac{dh}{dl} \quad (2.42)$$

όπου:

$v_x$ : η μέση γραμμική ταχύτητα (L/T),

$K$ : η υδραυλική αγωγιμότητα (L/T),

$n_e$ : το ενεργό πορώδες,



$\frac{dh}{dl}$ : η υδραυλική κλίση (L/L).

Το ενεργό πορώδες  $n_e$  (*effective porosity*), είναι το πορώδες δια μέσω του οποίου υφίσταται ροή, δεν περιλαμβάνει δηλαδή τους απομονωμένους πόρους.

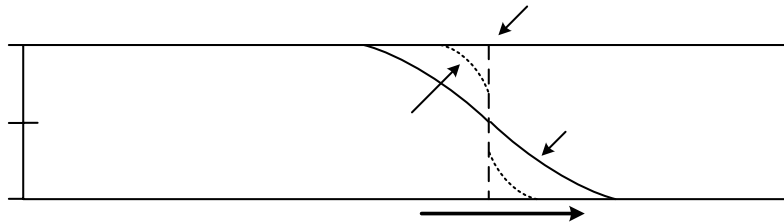
Η μονοδιάστατη ροή μάζας  $F_x$  λόγω οριζόντιας μεταφοράς, είναι ίση με την ποσότητα του ύδατος που ρέει, πολλαπλασιασμένη με τη συγκέντρωση των διαλυμένων στερεών:

$$F_x = v_x n_e C \quad (2.43)$$

Η μονοδιάστατη εξίσωση οριζόντιας μεταφοράς είναι:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.44)$$

Επιλύοντας την εξίσωση 2.44 προκύπτει η καμπύλη συγκέντρωσης με απότομη κλίση. Στο ανερχόμενο σκέλος της καμπύλης, η συγκέντρωση είναι ίση με αυτή όταν εισέρχεται το υπόγειο νερό, ενώ στο άλλο σκέλος της καμπύλης η συγκέντρωση είναι αμετάβλητη από την αρχική τιμή. Σε αυτή την περίπτωση (*plug flow*) όλο το υγρό των πόρων έχει αντικατασταθεί από την εισερχόμενη ουσία. Η απότομη επίδραση της ροής αυτής φαίνεται στο Σχήμα 2.14, όπου η κατακόρυφη διακεκομμένη γραμμή στη θέση V αντιστοιχεί στο μέτωπο καμπύλης που οφείλεται μόνο στην οριζόντια μεταφορά.



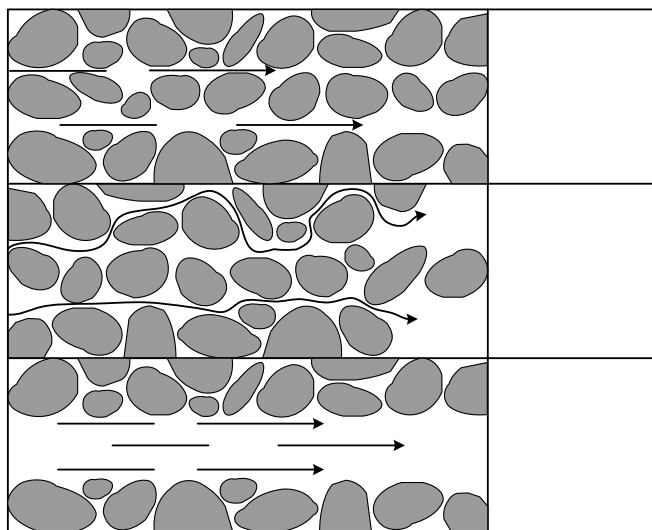
**Σχήμα 2.14:** Οριζόντια μεταφορά και επίδραση της διαμήκου διασποράς και διάχυσης στη μεταφορά διαλυμένης ουσίας σε μονοδιάστατη ροή (Καρατζάς, 2004).

Δεδομένου ότι τα γεωυλικά παρουσιάζουν ετερογένεια, η μεταφορά ουσιών σε διαφορετικά εδαφικά στρώματα έχει σαν αποτέλεσμα να προκύπτουν καμπύλες συγκέντρωσης διαλυμένης ουσίας με ποικίλες τιμές σε καθένα από αυτά.

#### 2.4.4.3 Μηχανική διασπορά

Τα υπόγεια ύδατα κινούνται με ταχύτητες που μπορεί να είναι είτε μικρότερες είτε μεγαλύτερες από τη μέση γραμμική ταχύτητα, φαινόμενο που, σε μακροσκοπική κλίμακα οφείλεται σε τρεις βασικούς παράγοντες (Σχήμα 2.15):

1. Κάποιοι από τους πόρους έχουν μεγαλύτερο μέγεθος από άλλους και έτσι το νερό κινείται ταχύτερα διαμέσου αυτών.
2. Κάποια μόρια νερού, ενώ καλύπτουν ίδια γραμμική απόσταση μέσα στο πορώδες υλικό, κινούνται κατά μήκος μεγαλύτερων διαδρομών.
3. Κατά την κίνηση του νερού διαμέσου των πόρων, η ταχύτητα είναι μικρότερη στις πλευρές αυτών από ότι στο μέσο τους.



**Σχήμα 2.15:** Παράγοντες που προκαλούν διαμήκη διασπορά σε μεμονωμένους πόρους (Καρατζάς, 2004).

Δεδομένου ότι τα υπόγεια ύδατα που περιέχουν διαλυμένες ουσίες δεν ταξιθεύουν με την ίδια ταχύτητα, δεν μπορεί να δημιουργηθεί μια ασυνεχής διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ του ρυπασμένου και μη ύδατος. Η ανάμιξη των ουσιών στα μονοπάτια της ροής ονομάζεται «μηχανική διασπορά» (*mechanical dispersion*) και έχει ως αποτέλεσμα τη διάλυση των ουσιών στη ροή. Η «διαμήκης διασπορά» (*longitudinal dispersion*) είναι η ανάμιξη που συμβαίνει κατά μήκος των διαδρομών ροής, ενώ η «εγκάρσια διασπορά» (*transverse dispersion*) πραγματοποιείται σε διευθύνσεις κάθετες σε αυτή (Καρατζάς, 2004).

Με βάση το νόμο διάχυσης του Fick και το γεγονός ότι η ποσότητα της μηχανικής διασποράς είναι συνάρτηση της μέσης γραμμικής ταχύτητας, εισάγεται μια σταθερά, ο συντελεστής επιμήκους και εγκάρσιας μηχανικής διασποράς. Ο συντελεστής αυτός είναι ίσος με το γινόμενο του συντελεστή δυναμικής διασποράς  $\alpha$  (*dynamic dispersivity* ή απλώς *dispersivity*) με τη μέση γραμμική ταχύτητα. Εάν  $i$  είναι η κύρια κατεύθυνση ροής ισχύουν οι ορισμοί:

$$\text{Συντελεστής επιμήκους μηχανικής διασποράς} = \alpha_i v_i \quad (2.45)$$

όπου:

$v_i$ : η μέση γραμμική ταχύτητα στην  $i$  κατεύθυνση (L/T),

$\alpha_i$ : ο συντελεστής δυναμικής διασποράς στην  $i$  κατεύθυνση (L),

και

$$\text{Συντελεστής εγκάρσιας μηχανικής διασποράς} = \alpha_j v_i \quad (2.46)$$

όπου:

$v_i$ : η μέση γραμμική ταχύτητα στην  $i$  κατεύθυνση (L/T),

$\alpha_j$ : ο συντελεστής δυναμικής διασποράς στην  $j$  κατεύθυνση (L).

#### 2.4.4.4 Υδροδυναμική διασπορά

Η μοριακή διάχυση δεν ξεχωρίζει από τη μηχανική διασπορά στα κινούμενα υπόγεια ύδατα, αντίθετα οι δυο αυτοί μηχανισμοί συνδυάζονται και καθορίζουν το συντελεστή υδροδυναμικής διασποράς  $D$  (*hydrodynamic dispersion coefficient*), ο οποίος εκφράζεται ως:

$$D_L = \alpha_L v_i + D^* \quad (2.47)$$

$$D_T = \alpha_T v_i + D^* \quad (2.48)$$

όπου:

$D_L$ : η σταθερά υδροδυναμικής διασποράς παράλληλα στην κύρια κατεύθυνση ροής (διαμήκης),

$D_T$ : η σταθερά υδροδυναμικής διασποράς κάθετα στην κύρια κατεύθυνση ροής (εγκάρσια),

$\alpha_L$ : ο συντελεστής διαμήκους δυναμικής διασποράς,

$\alpha_T$ : ο συντελεστής εγκάρσιας δυναμικής διασποράς.

Στο Σχήμα 2.14, απεικονίζεται η επίδραση της διάχυσης και της μηχανικής

διασποράς στην σχετική συγκέντρωση ( $C/C_0$ ) μιας διαλυμένης ουσίας που εγχύθηκε μέσα σε πορώδες υλικό και δρα ως ανιχνευτής. Η κατακόρυφη γραμμή στο σημείο  $V$  αντιπροσωπεύει τη μεταφορά των ουσιών χωρίς διασπορά, ενώ φαίνονται επίσης τα αποτελέσματα της διάχυσης και της μηχανικής διασποράς.

Το Σχήμα 2.16 διασαφηνίζει την εξέλιξη της υδροδυναμικής διασποράς, όπου μάζα διαλυμένης ουσίας αρχικής συγκέντρωσης  $C_0$  εμφανίζεται στιγμιαία στον υδροφορέα τη χρονική στιγμή  $t_0$  και για διάστημα  $x=0+a$ . Κατά την κίνηση του υπόγειου ύδατος η μάζα της διαλυμένης ουσίας συμπαρασύρεται, απλώνεται και έτσι η μέγιστη συγκέντρωσή της μειώνεται με το χρόνο. Με βάση το μοντέλο της διάχυσης για υδροδυναμική διασπορά, αναμένεται ότι η καμπύλη συγκέντρωσης θα ακολουθεί την κατανομή Gauss, η οποία περιγράφεται από το μέσο όρο και την διακύμανση. Έτσι, οι σταθερές της διαμήκους και εγκάρσιας υδροδυναμικής διάχυσης περιγράφονται αντίστοιχα από τις σχέσεις 2.49 και 2.50:

$$D_L = \frac{\sigma_L^2}{2t} \quad (2.49)$$

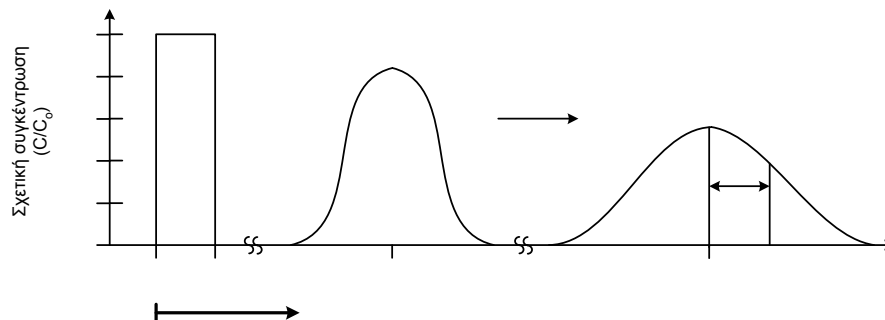
$$D_T = \frac{\sigma_T^2}{2t} \quad (2.50)$$

όπου:

$t$ : χρόνος,

$\sigma_L^2$ : μεταβλητότητα της διαμήκους διασποράς,

$\sigma_T^2$ : μεταβλητότητα της εγκάρσιας διασποράς.



**Σχήμα 2.16:** Οριζόντια μεταφορά και διασπορά του ρύπου με το χρόνο. Η ουσία με συγκέντρωση  $C_0$  εγχύθηκε στο  $x=0+a$ , τη χρονική στιγμή  $t_0$ , και η υπόγεια ροή γίνεται προς τα δεξιά.

2.4.4.5 Η εξίσωση συμμεταφοράς-διασποράς για μεταφορά διαλυμένων ουσιών  
Αρχικά θεωρείται ότι το πορώδες υλικό είναι ομογενές, ισότροπο και κορεσμένο, καθώς και ότι οι συνθήκες ροής είναι τέτοιες ώστε να μπορεί να εφαρμοστεί ο νόμος του Darcy.

Θεωρείται επίσης ένας όγκος ελέγχου και εξετάζονται οι ροές που εισέρχονται και εξέρχονται από τον βασικό αυτό όγκο ανά μονάδα επιφάνειας. Η μέση γραμμική ταχύτητα είναι  $v$  και οι επιμέρους συνιστώσες της  $v_x, v_y, v_z$ . Η συγκέντρωση της διαλυμένης ουσίας  $C$  εκφράζεται ως η μάζα ανά όγκο διαλύτη (στην περίπτωση ρύπου εκφράζει τη μάζα αυτού ανά όγκο ύδατος στον οποίο αυτός διαλύεται). Η μάζα της διαλυμένης ουσίας ανά μονάδα όγκου του υδροφορέα εκφράζεται ως το γινόμενο της συγκέντρωσης  $C$  επί το πορώδες  $n_e$ , το οποίο είναι σταθερό σε ομοιογενείς υδροφορείς.

Στη γενική περίπτωση για μεταφορά μάζας προς την κατεύθυνση  $i$  γίνεται συμμεταφορά και διασπορά:

1. Ο όρος της συμμεταφοράς:

$$\text{Συμμεταφορά} = v_i n_e C_d A \quad (2.51)$$

2. Ο όρος της διασποράς:

$$\text{Διασπορά} = n_e D_i \frac{\partial C}{\partial i} dA \quad (2.52)$$

Όπου  $dA$  το εμβαδό της διατομής κάθετα στη ροή.

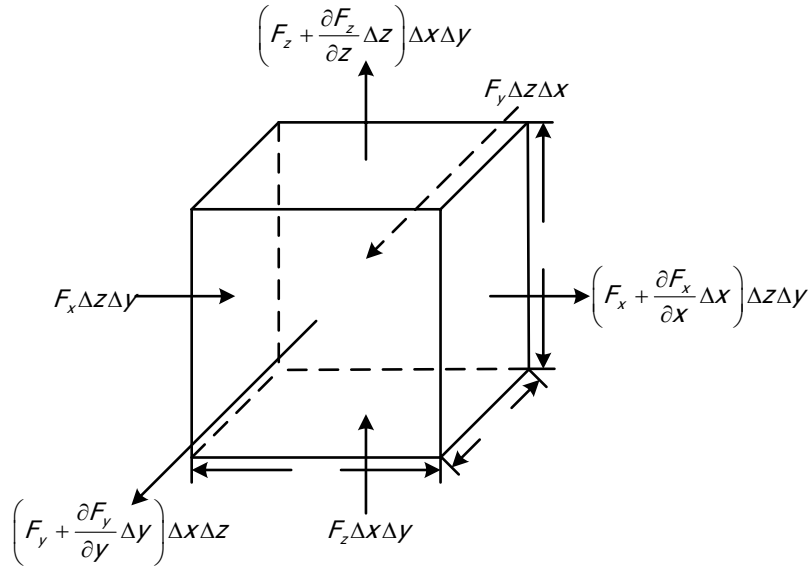
Με βάση τα παραπάνω, η ολική μάζα της διαλυμένης ουσίας ανά μονάδα επιφάνειας θα αποτελεί το άθροισμα των δύο όρων:

$$F_i = v_i n_e C_d - n_e D_i \frac{\partial C}{\partial i} \quad (2.53)$$

Το αρνητικό πρόσημο στον όρο της διασποράς προκύπτει από το γεγονός ότι αυτή λαμβάνει χώρα από περιοχές με υψηλή συγκέντρωση, σε περιοχές με χαμηλή.

Έστω ο αντιπροσωπευτικός όγκος του Σχήμα 2.17. Σε αυτόν η ολική εισερχόμενη ποσότητα είναι:

$$F_x \Delta z \Delta y + F_y \Delta z \Delta x + F_z \Delta x \Delta y \quad (2.54)$$



**Σχήμα 2.17:** Αντιπροσωπευτικός βασικός όγκος ελέγχου.

ενώ η ολική εξερχόμενη ποσότητα:

$$\left(F_x + \frac{\partial F_x}{\partial x} \Delta x\right) \Delta z \Delta y + \left(F_y + \frac{\partial F_y}{\partial y} \Delta y\right) \Delta x \Delta z + \left(F_z + \frac{\partial F_z}{\partial z} \Delta z\right) \Delta x \Delta y \quad (2.55)$$

Οι δύο αυτές ποσότητες διαφέρουν κατά:

$$-\left(\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z}\right) \Delta x \Delta y \Delta z \quad (2.56)$$

που αντιστοιχεί στη μεταβολή της ποσότητας μάζας μέσα στον όγκο ελέγχου. Ο ρυθμός αλλαγής της μάζας είναι:

$$n_e \frac{\partial C}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z \quad (2.57)$$

$\Delta x$

Με βάση την αρχή διατήρησης της μάζας, ο ρυθμός αλλαγής της μάζας μέσα στον όγκο ελέγχου είναι ίσος με τη διαφορά της εισερχόμενης και εξερχόμενης μάζας. Άρα από τις σχέσεις 2.56 και 2.57 προκύπτει:

$$\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} = -n_e \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.58)$$

Με αντικατάσταση των  $F_x$ ,  $F_y$ ,  $F_z$ , προκύπτει η τρισδιάστατη εξίσωση μεταφοράς μάζας για συντηρητική ουσία (δεν αντιδρά με το πορώδες υλικό και δεν αποσυντίθεται βιολογικά ή ραδιενεργά). Στην περίπτωση που η μέση γραμμική

ταχύτητα  $v_x$  είναι ομοιόμορφη στο χώρο, η εξίσωση της μεταφοράς μάζας για μονοδιάστατη ροή σε ομοιογενές και ισότροπο μέσο γίνεται:

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.59)$$

Η εξίσωση μεταφοράς μάζας για ουσία η οποία αντιδρά (προσροφάται) με το πορώδες υλικό γίνεται:

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{B_d}{n} \frac{\partial S}{\partial t} \quad (2.60)$$

όπου:

$B_d$  : η μέση πυκνότητα του εδαφικού σχηματισμού

$S$  : η συγκέντρωση της ρυπαντικής ουσίας που είναι προσροφημένη από το πορώδες υλικό με:

$$S = kC^\eta \quad (2.60)$$

όπου:  $k$  και  $\eta$  εμπειρικοί εδαφικοί παράμετροι.

### **3. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΡΟΗΣ**

#### **3.1 Γενικά**

Η χρήση αριθμητικών μεθόδων μπορεί να αποτελέσει ένα σημαντικό εργαλείο για τον μηχανικό, αφενός μεν κατά τη φάση σχεδιασμού, αφετέρου δε κατά τη φάση εκτέλεσης ενός έργου, με την προϋπόθεση ότι εφαρμόζεται σωστά, λαμβάνονται δηλαδή υπόψη κατά περίπτωση οι δυνατότητες και οι περιορισμοί κάθε μεθόδου (Αγιουτάντης, 2002).

Εκτενείς έρευνες στο πεδίο της ροής και μεταφοράς μάζας στην ακόρεστη ζώνη έχουν οδηγήσει σε ένα μεγάλο αριθμό δημοσιεύσεων γύρω από το θέμα. Οι περισσότερες από τις παλαιότερες μελέτες χρησιμοποιούσαν μεθόδους πεπερασμένων διαφορών για την επίλυση των κύριων εξισώσεων που διέπουν το πρόβλημα ενώ πιο πρόσφατα έχουν γίνει αντίστοιχες δημοσιεύσεις που χρησιμοποιούν τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων (van Genuchten, 1982).

Τα αριθμητικά μοντέλα προσέγγισης αποτελούν ένα σημαντικό εργαλείο στην περιβαλλοντική έρευνα δεδομένου ότι πολλά προβλήματα ροής και μεταφοράς μάζας κοντά στην επιφάνεια του εδάφους μπορούν να επιλυθούν μόνο αριθμητικά λόγω κυρίως της ετερογένειας του εδάφους, της μη γραμμικότητας των φυσικών ιδιοτήτων αυτού, της ανομοιόμορφης απορρόφησης ύδατος από τις ρίζες των φυτών αλλά και των ραγδαίων μεταβολών των συνοριακών συνθηκών. Έτσι, η ροή του εδαφικού νερού, όπως προσομοιώνεται από τα αριθμητικά μοντέλα, παίζει σημαντικό ρόλο λόγω της επίδρασης που έχει στον υδρολογικό κύκλο, στη μεταφορά ρύπων, στη ροή θερμότητας και την ανάπτυξη των φυτών (van Dam and Feddes, 2000).

#### **3.2 Κυριότερες αριθμητικές μέθοδοι**

Οι πρώτες εφαρμογές αριθμητικών μεθόδων πραγματοποιήθηκαν σε προβλήματα κατασκευής τεχνικών έργων, ρευστομηχανικής κλπ. Τα τελευταία χρόνια και σε συνδυασμό με την αλματώδη ανάπτυξη των υπολογιστικών συστημάτων, η χρήση αριθμητικών μεθόδων βρίσκει ολοένα και περισσότερες



εφαρμογές σε προβλήματα μηχανικού. Οι κυριότερες από αυτές είναι (Αγιουτάντης, 2002):

- Μέθοδος των Πεπερασμένων Στοιχείων (*finite element method*).
- Μέθοδος των Πεπερασμένων Διαφορών (*finite difference method*).
- Μέθοδος των Συνοριακών Στοιχείων (*boundary element method*).
- Μέθοδος των Διακριτών (ή διακεκριμένων) Στοιχείων (*distinct element method*).
- Υβριδικές Μέθοδοι (*hybrid methods*), οι οποίες συνδυάζουν χαρακτηριστικά από μια ή περισσότερες μεθόδους.

### 3.3 Σύγκριση ΜΠΣ με ΜΠΔ

Κάθε μέθοδος έχει ορισμένα πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα όσον αφορά την εφαρμογή της σε συγκεκριμένα προβλήματα, γι' αυτό και δεν διακρίνεται καμία βέλτιστη, η οποία να παρέχει ικανοποιητικά αποτελέσματα σε όλες τις περιπτώσεις ανάλυσης φυσικών συστημάτων. Για παράδειγμα η Μέθοδος των Πεπερασμένων Στοιχείων (ΜΠΣ) πλεονεκτεί σε περιπτώσεις που αντιμετωπίζονται προβλήματα με περίπλοκη γεωμετρία και σε ροή στις δύο ή τρεις διαστάσεις. Σε περιπτώσεις μονοδιάστατων προβλημάτων πλεονεκτεί η Μέθοδος των Πεπερασμένων Διαφορών (ΜΠΔ) διότι δεν απαιτεί την σύγκριση του αθροίσματος των μαζών του νερού σε κάθε κόμβο με την συνολική αρχική μάζα νερού του συστήματος για την αποφυγή της διακύμανσής της. Επίσης, είναι σχετικά εύκολη στην κατανόηση και την εφαρμογή της (van Dam and Feddes, 2000).

Οι αριθμητικές προσεγγίσεις με τις μεθόδους των Πεπερασμένων Στοιχείων και των Πεπερασμένων Διαφορών διαφέρουν από άποψη φιλοσοφίας. Στη ΜΠΔ, η τιμή της άγνωστης μεταβλητής (π.χ. του υδραυλικού ύψους  $h$  για τη ροή του υπεδάφιου ύδατος) υπολογίζεται σε έναν κόμβο και αποτελεί ταυτόχρονα τη μέση τιμή για το κελί που περιβάλλει τον κόμβο. Αντίθετα, στη ΜΠΣ η διακύμανση της τιμής της μεταβλητής μέσα σε ένα στοιχείο ορίζεται επακριβώς με τη χρήση γραμμικών και μη γραμμικών συναρτήσεων παρεμβολής. Τα θετικά χαρακτηριστικά της ΜΠΔ σε σχέση με τη ΜΠΣ είναι ότι είναι απλούστερη στην

κατανόηση και τον προγραμματισμό και γενικά απαιτεί μικρότερο αριθμό δεδομένων εισόδου (Mansell et al., 2002).

Στη συνέχεια αναπτύσσονται τα χαρακτηριστικά της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών που είναι η μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα εργασία.

### **3.4 Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών**

#### **3.4.1 Αρχή της μεθόδου**

Στη Μέθοδο των Πεπερασμένων Διαφορών (ΜΠΔ) ο υπό μελέτη χώρος διαιρείται (διακριτοποίηση) σε έναν ομοιόμορφο κάνναβο ώστε να σχηματιστούν ισομεγέθη (συνήθως) κελιά. Κατά τη μέθοδο αυτή, η διαφορική εξίσωση εκφράζεται με βάση την τιμή της συνάρτησης σε κάθε σημείο του καννάβου καθώς και με βάση τις παραγώγους της συνάρτησης γύρω από κάθε σημείο. Οι ΜΠΔ διακρίνονται (σε forward, backward κλπ.) ανάλογα με τον τρόπο υπολογισμού των παραγώγων σε κάθε σημείο του καννάβου. Οι άγνωστες ποσότητες υπολογίζονται σε κάθε σημείο του καννάβου με την επίλυση του αντίστοιχου αλγεβρικού συστήματος εξισώσεων (Αγιουτάντης, 2002).

#### **3.4.2 Υπολογισμός παραγώγων**

##### *3.4.2.1 Γενικά*

Η συμπεριφορά αρκετών φυσικών διαδικασιών, ειδικά σε συστήματα που υπόκεινται σε αλλαγές συναρτήσεως του χρόνου, περιγράφεται από διαφορικές εξισώσεις. Έτσι, για τους μηχανικούς είναι πολύ σημαντική η γνώση των μεθόδων επίλυσής τους. Παρόλο που ένας μεγάλος αριθμός σημαντικών διαφορικών εξισώσεων μπορεί να επιλυθεί με αναλυτικές μεθόδους, ένας άλλος μεγαλύτερος ίσως αριθμός, μπορεί να επιλυθεί μόνο αριθμητικά (Carnahan et al., 1969).

Η ροή στην ακόρεστη και κορεσμένη ζώνη, περιγράφεται από μερικές διαφορικές εξισώσεις.

##### *3.4.2.2 Μερικές διαφορικές εξισώσεις*

Οι γραμμικές μερικές διαφορικές εξισώσεις (ΜΔΕ) δεύτερης τάξης συχνά

αναφέρονται ως εξισώσεις ελλειπτικού, παραβολικού ή υπερβολικού τύπου. Αυτή η ταξινόμηση είναι εφικτή αν η εξίσωση έχει περιοριστεί με κατάλληλο μετασχηματισμό των ανεξάρτητων μεταβλητών σε μια μορφή του τύπου (Carnahan et al., 1969):

$$\sum_{i=1}^n A_i \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} + \sum_{i=1}^n B_i \frac{\partial u}{\partial x_i} + Cu + D = 0 \quad (3.1)$$

στην οποία οι παράμετροι  $A_i$  που έχουν εκτιμηθεί στο σημείο  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  παίρνουν τις τιμές 1, -1 και 0. Στην εξίσωση 3.1, το  $u$  είναι η εξαρτημένη μεταβλητή και τα  $x_i$  οι ανεξάρτητες. Παρατηρείται η απουσία σύνθετων διαφορικών (του τύπου  $\partial^2 u / \partial x_i \partial x_j$  με  $i \neq j$ ). Οι κυριότερες περιπτώσεις είναι οι ακόλουθες (Carnahan et al., 1969):

1. Στην περίπτωση που όλες οι παράμετροι  $A_i$  είναι μη μηδενικές και έχουν το ίδιο πρόσημο, η ΜΔΕ είναι *ελλειπτικής* μορφής.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (3.2)$$

2. Στην περίπτωση που όλες οι παράμετροι  $A_i$  είναι μη μηδενικές και έχουν (εκτός από μια) το ίδιο πρόσημο, η ΜΔΕ είναι *υπερβολικής* μορφής.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad (3.3)$$

3. Στην περίπτωση που μια από τις παραμέτρους  $A_i$  είναι μηδενική και οι υπόλοιπες μη μηδενικές και έχουν το ίδιο πρόσημο, ενώ η παράμετρος  $B_k$  του  $\partial u / \partial x_k$  είναι μη μηδενική, η ΜΔΕ είναι *παραβολικής* μορφής.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{\partial u}{\partial t} \quad (3.4)$$

Δεδομένου ότι οι παράμετροι  $A_i$ ,  $B_i$ ,  $C$  και  $D$  είναι συναρτήσεις των ανεξάρτητων μεταβλητών  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , η ταξινόμηση μιας ΜΔΕ μπορεί να ποικίλει ανάλογα με το συγκεκριμένο σημείο που θεωρείται στον  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  χώρο. Πολύ συχνά μια από τις ανεξάρτητες μεταβλητές είναι ο χρόνος και οι υπόλοιπες είναι οι συντεταγμένες χώρου  $x$ ,  $y$  και  $z$  (Carnahan et al., 1969).

### 3.4.3 Αρχικές και συνοριακές συνθήκες

Προκειμένου να οριστεί το φυσικό σύστημα, πρέπει να παρέχονται οι αρχικές

συνθήκες που αφορούν το υδραυλικό ύψος ή την περιεχόμενη υγρασία και οι συνοριακές συνθήκες που αφορούν το υδραυλικό ύψος ή τη ροή μάζας. Η μαθηματική επίλυση της εξίσωσης (2.10) περιλαμβάνει τη διακριτοποίηση της εξίσωσης ροής στο χώρο και στο χρόνο και την εφαρμογή μιας διαδικασίας χρονικών βημάτων για καθένα από τα οποία δίνεται μια αναλυτική ή επαναληπτική λύση ενός τελικού σετ (διδάνυσμα) αλγεβρικών εξισώσεων (Mohanty and van Genuchten, 1996).

Σε ήπιες καιρικές συνθήκες και συνθήκες διαβροχής του εδάφους, η συνοριακή συνθήκη για την επιφάνεια του εδάφους ορίζεται με ελεγχόμενη ροή μάζας. Σε περίπτωση που οι καιρικές ή οι εδαφικές συνθήκες έχουν υψηλό ποσοστό υγρασίας, το νερό που συσσωρεύεται στην επιφάνεια αρχίζει να κυριαρχεί κατά τη μεταφορά μάζας μέσω διήθησης. Τέλος, στην περίπτωση που υπάρχουν παρατεταμένες περίοδοι ξηρασίας, το εδαφικό νερό στην επιφάνεια μετατρέπεται σε ατμοσφαιρική υγρασία και επομένως κυριαρχεί η μεταφορά μάζας μέσω εξάτμισης (van Dam and Feddes, 2000).

Ένας κατάλληλος ορισμός της συνοριακής συνθήκης του άνω εδαφικού ορίου κατά τη διάρκεια της επαναληπτικής επίλυσης της εξίσωσης του Richards καθορίζει την επιτυχία ή μη ενός αριθμητικού μοντέλου. Τα υδραυτικά ύψη του εδαφικού νερού μπορεί να μεταβληθούν πολύ απότομα κοντά στην επιφάνεια. Για παράδειγμα, σε περίπτωση άρδευσης ή ισχυρής βροχόπτωσης μετά από μια ξηρή περίοδο, το υδραυλικό ύψος μπορεί να μεταβληθεί από  $-10^6$  σε 0 cm. Επίσης, όταν τα κορεσμένα εδάφη γίνονται μη κορεσμένα, η κατανομή του υδραυλικού ύψους κοντά στην επιφάνεια μεταβάλλεται ραγδαία. Επίσης, αξίζει να σημειωθεί ότι η συνοριακή συνθήκη του πάνω ορίου μπορεί να μεταβληθεί από ελεγχόμενου υδραυλικού ύψους σε ελεγχόμενης ροής και το αντίστροφο κατά τη διάρκεια της επαναληπτικής επίλυσης της εξίσωσης Richards (van Dam and Feddes, 2000).

#### *3.4.3.1 Πρώτου τύπου συνοριακές συνθήκες*

Στις πρώτου τύπου συνοριακές συνθήκες θεωρείται ότι η τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής που λαμβάνει χώρα στη βασική μερική διαφορική εξίσωση επίλυσης, είναι σταθερή. Αυτή η συνοριακή συνθήκη αποτελεί μία συνθήκη τύπου

Dirichlet.

#### 3.4.3.2 Δεύτερου τύπου συνοριακές συνθήκες

Στις δεύτερου τύπου συνοριακές συνθήκες θεωρείται ότι η τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής που λαμβάνει χώρα στη βασική μερική διαφορική εξίσωση επίλυσης, δεν είναι σταθερή, αλλά η κλίση αυτής λαμβάνει σταθερές τιμές. Αυτή η συνοριακή συνθήκη αποτελεί μία συνθήκη τύπου Newmann.

Στην ακόρεστη ζώνη η εξαρτημένη μεταβλητή της εξίσωσης ροής είναι η περιεκτικότητα της υγρασίας  $\theta$ , ενώ στην κορεσμένη είναι το υδραυλικό ύψος  $h$ . Αντίστοιχα η εξαρτημένη μεταβλητή της εξίσωσης μεταφοράς ρύπου και για τις δύο ζώνες, είναι η συγκέντρωση.

### 3.5 Σφάλμα του ισοζυγίου μάζας

Γενικά το ισοζύγιο του νερού (WB) υπολογίζεται ως ακολούθως:

$$WB = \text{Κατακρήμνιση} - \text{Πραγματική εξάτμιση} - \text{Πραγματική διαπνοή} \\ - \text{Απορροή}$$

Το σφάλμα του ισοζυγίου νερού δεν μπορεί να παρουσιαστεί σαν ποσοστιαίο σφάλμα, λόγω του ότι ανάλογα με το «σημείο αναφοράς» μπορεί να παράγεται σημαντικό ή μη σφάλμα. Για παράδειγμα έστω ότι η προσομοίωση που εξετάζεται έχει ένα σύνολο 10 κυβικών μέτρων σε βροχόπτωση και 50 κυβικών μέτρων πραγματικής εξάτμισης σε όλη την επιφάνεια και για τη συνολική διάρκεια της προσομοίωσης. Αν το σφάλμα είναι ίσο με 1,5 κυβικά, τότε πρέπει να κριθεί αν τα 1,5 κυβικά είναι σημαντικά σε σχέση με τα 10, ή αν είναι ασήμαντα σε σχέση με τα 50 κυβικά. Ίσως ένας αξιόπιστος τρόπος υπολογισμού ποσοστιαίου σφάλματος είναι ο εξής:

$$\% \text{σφάλμα} = 100 * 1,5 / (10 - 50) = -3.75\%$$

Τυπικοί λόγοι πρόκλησης σφαλμάτων είναι:

**Επίλυση με μηδενική ή φτωχή σύγκλιση:** Σε αυτή την περίπτωση πρέπει τα κριτήρια σύγκλισης να είναι πιο αυστηρά, ώστε οι επιλυόμενες πιέσεις και θερμοκρασίες να έχουν μικρότερη διακύμανση μεταξύ των στοιχείων. Αυτό επιτρέπει τον πιο ακριβή υπολογισμό σε οποιοδήποτε στοιχείο με ανάδρομη επίλυση της τιμής της ροής και της μεταβολής μάζας.

**Κακά σχήματα στοιχείων του δικτυώματος:** Στην περίπτωση της 2D και 3D προσομοίωσης αν κάποιο από τα στοιχεία που χρησιμοποιούνται στο δικτύωμα είναι μακρύ και στενό, με τις συνοριακές συνθήκες να εφαρμόζονται στο τέλος της μακριάς πλευράς του στοιχείου, αυτό μπορεί να οδηγήσει σε σφάλμα στον υπολογισμό της ροής κατά μήκος αυτού του συνόρου. Σε αυτή την περίπτωση τα στοιχεία που βρίσκονται κοντά στα όρια του δικτυώματος επανασχεδιάζονται ώστε το τελικό τους σχήμα να προσεγγίζει το τετράγωνο.

**Πολύ μεγάλα χρονικά βήματα:** Αν το χωρικό βήμα είναι πολύ λεπτομερές, είναι πιθανόν απαραίτητο να μειωθούν τα ελάχιστα επιτρεπόμενα χρονικά βήματα. Ένα λογικό ελάχιστο χρονικό βήμα για μια βραχυπρόθεσμη ανάλυση στην οποία έχει επιλεγεί η ημιτονοειδής κλιματική κατανομή, είναι της τάξης των 1000 δευτερολέπτων.

**Πολύ μεγάλα χωρικά βήματα:** Στην περίπτωση που τα χωρικά βήματα είναι αρκετά μεγάλα, ειδικά κοντά στην επιφάνεια, απότομες μεταβολές πίεσης διαμέσου μεγάλων στοιχείων δεν μπορούν να προσομοιωθούν σωστά. Μπορεί να καταστεί απαραίτητο να χρησιμοποιηθεί μια πιο λεπτομερής διακριτοποίηση στον κατακόρυφο άξονα τουλάχιστον για τα πιο επιφανειακά στοιχεία. Η κατακόρυφη απόσταση μεταξύ των κόμβων κοντά στην επιφάνεια πρέπει να είναι μικρότερη των 10cm. Η οριζόντια απόσταση, στην περίπτωση της 2D και 3D προσομοίωσης, μεταξύ των κόμβων κοντά στην επιφάνεια δεν θεωρείται τόσο σημαντική.

### 3.6 Courant number ( $C_r$ )

Οι δύο τελευταίοι λόγοι πρόκλησης σφαλμάτων δύναται να ελαχιστοποιηθούν επιλέγοντας μικρά αλλά και της ίδιας τάξεως χωρικά και χρονικά διαφορικά. Η σχέση που συνδέει τα δύο μεγέθη ονομάζεται *αριθμός Courant* ( $C_r$ ) και δίνεται από τον τύπο:

$$C_r = \bar{v} \frac{dt}{dx} \quad (3.5)$$

όπου:

$\bar{v}$ : η μέση ταχύτητα στη διεύθυνση του  $x$ ,

$dt$ : το διαφορικό χρόνου, και

$dx$ : το διαφορικό χώρου.

Για να επιτύχουμε σύγκλιση αποφεύγοντας αριθμητικά σφάλματα, ο αριθμός *Courant* θα πρέπει σε κάθε χρονικό βήμα να είναι μικρότερος ή ίσος της μονάδος (www.mines.edu, 2006).

## **4. ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ ΣΕ ΓΛΩΣΣΑ MATLAB**

### **4.1 Μαθηματικό υπόβαθρο**

Για την ανάπτυξη του αλγορίθμου προσομοίωσης της ροής ύδατος και μεταφοράς ρύπου στην ακόρεστη και κορεσμένη ζώνη, χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό πακέτο Matlab (έκδοση 7.1). Ο κώδικας είναι διαχωρισμένος σε αυτόνομες υπορουτίνες, ανάλογα με το είδος επίλυσης που καλείται από το περιβάλλον χρήσης που έχει κατασκευαστεί και περιγράφεται αναλυτικότερα παρακάτω.

Οι δύο βασικές υπορουτίνες του προγράμματος είναι αυτή της ακόρεστης και κορεσμένης ζώνης όπου επιλύονται με χρήση της Μεθόδου Πεπερασμένων Διαφορών η ροή ύδατος και η μεταφορά ρύπου αντίστοιχα για κάθε ζώνη, σε μία διάσταση (*1D finite differences*). Συνοδεύεται, επίσης, από δύο δευτερεύουσες υπορουτίνες αυτή της αριθμητικής επίλυσης μονοδιάστατης εξίσωσης με χρήση της μεθόδου Newton-Raphson, και αυτή της στρογγυλοποίησης δεκαδικού αριθμού στον αμέσως μεγαλύτερο ακέραιο.

Η τελευταία υπορουτίνα χρησιμοποιείται στη διακριτοποίηση του φυσικού συστήματος προσομοίωσης. Ο χρήστης εισαγάγει στο πρόγραμμα την τιμή της στοιχειώδους απόστασης και την τιμή του στοιχειώδους χρόνου, οι οποίες διαιρούν την ολική απόσταση και ολικό χρόνο προσομοίωσης για να υπολογιστούν τα χωρικά και χρονικά βήματα (υπολογισμών) αντίστοιχα. Επειδή είναι πιθανό να παραχθεί μη ακέραιος αριθμός, η υπορουτίνα που προαναφέρθηκε, τον στρογγυλοποιεί στον αμέσως μεγαλύτερο ακέραιο. Στον συνολικό αριθμό των χωρικών κόμβων προστίθενται άλλοι δύο: ένας στην αρχή και ένας στο τέλος του διαστήματος μελέτης στους οποίους ορίζονται οι αρχικές και συνοριακές συνθήκες.

#### **4.1.1 Ακόρεστη ζώνη**

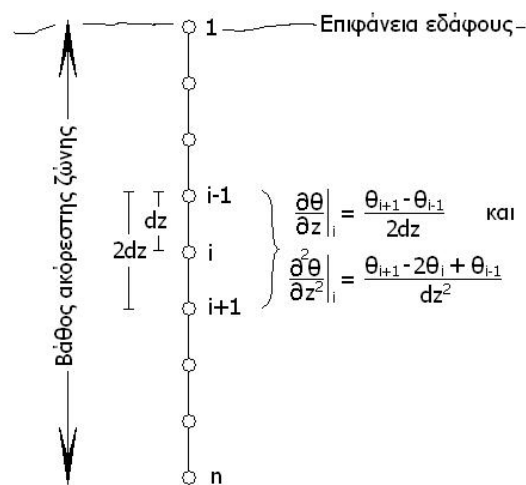
##### *4.1.1.1 Διακριτοποίηση*

Η διακριτοποίηση του εδαφικού προφίλ περιλαμβάνει τη διαίρεση του βάθους της ακόρεστης ζώνης με το στοιχειώδες βάθος, την τιμή του οποίου εισαγάγει ο



χρήστης. Το πλήθος των κόμβων ( $n$ ) που παράγονται, προσαυξάνεται κατά δύο, έναν στην αρχή και έναν στο τέλος του εδαφικού προφίλ. Οι τιμές των μεγεθών στους δύο αυτούς ακριανούς κόμβους αντιστοιχούν στις συνοριακές συνθήκες.

Η πρώτη παράγωγος της υγρασίας συναρτήσει του βάθους στον κόμβο  $i$  (που αποτελεί και το βασικό μέγεθος υπολογισμού της ακόρεστης ζώνης), υπολογίζεται αριθμητικά από το πηλίκο της διαφοράς της υγρασίας του κόμβου  $i+1$  με αυτή του κόμβου  $i-1$  με τη μεταξύ τους απόσταση. Η δεύτερη παράγωγος στον ίδιο κόμβο υπολογίζεται αριθμητικά από το πηλίκο της διαφοράς της τιμής της πρώτης παραγώγου της υγρασίας του σημείου που βρίσκεται στο μέσο μεταξύ των κόμβων  $i$  και  $i+1$  από αυτή του σημείου που βρίσκεται στο μέσο μεταξύ των κόμβων  $i-1$  και  $i$ , με την μεταξύ τους απόσταση (Σχήμα 4.1).



**Σχήμα 4.1:** Διακριτοποίηση και υπολογισμός πρώτων και δεύτερων παραγώγων.

Στην περίπτωση που υπάρχουν δύο ή παραπάνω στρώματα, οι μερικές παράγωγοι υπολογίζονται με τον ίδιο τρόπο. Η διακριτοποίηση γίνεται με τέτοιο τρόπο ώστε σε κάθε επίπεδο αλλαγής εδαφικών ιδιοτήτων να υπάρχει ένας κόμβος. Κατά την επίλυση, ωστόσο, των εξισώσεων ροής και μεταφοράς ρύπου στο συγκεκριμένο κόμβο, η τιμή του συντελεστή της υδραυλικής αγωγιμότητας προκύπτει από το συνδυασμό των συντελεστών υδραυλικής αγωγιμότητας των εκατέρωθεν στρωμάτων.

#### 4.1.1.2 Εξισώσεις ροής ύδατος

Η εξίσωση 2.10 μέσω των εξισώσεων 2.11 και 2.12 γίνεται:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K(\theta) \frac{\partial \Psi(\theta)}{\partial z} - K(\theta) \right) \quad (4.1)$$

Στην παρούσα εργασία για τον συσχετισμό των τριχοειδών πιέσεων ( $\Psi$ ) και της υδραυλικής αγωγιμότητας ( $K$ ) με την περιεχόμενη υγρασία ( $\theta$ ) γίνεται η χρήση των εμπειρικών εξισώσεων των Brooks & Corey. Έτσι όταν  $\Psi \leq \Psi_b$ :

$$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) \left( \frac{\Psi}{\Psi_b} \right)^{-\lambda} \Rightarrow \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \left( \frac{\Psi}{\Psi_b} \right)^{-\lambda} \Rightarrow \left( \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{-\frac{1}{\lambda}} = \frac{\Psi}{\Psi_b} \Rightarrow$$

$$\Psi(\theta) = \Psi_b \left( \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{\frac{1}{\lambda}} \quad (4.2)$$

$$K(\theta) = K_s \left( \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^n \quad (4.3)$$

οπότε η 4.1 γίνεται:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K_s \left( \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^n \frac{\partial \left( \Psi_b \left( \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{\frac{1}{\lambda}} \right)}{\partial z} - K_s \left( \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^n \right) \quad (4.4)$$

Από την εξίσωση 4.4 φαίνεται ότι η μοναδική εξαρτημένη μεταβλητή είναι η περιεκτικότητα του εδάφους σε υγρασία  $\theta$ , εφόσον όλες οι υπόλοιπες εξαρτημένες μεταβλητές έχουν εκφραστεί συνάρτησι του  $\theta$ . Η παραγωγή του δεύτερου μέλους της εξίσωσης 4.4 οδηγεί ουσιαστικά σε μορφή που άγνωστες μεταβλητές είναι το  $\theta$ , και η πρώτη και δεύτερη παράγωγος του  $\theta$  ως προς το βάθος  $z$ . Έτσι για την επίλυση της ροής αρκεί σε κάθε χωρικό βήμα να υπολογιστούν οι τιμές του  $\theta$ , του  $\partial \theta / \partial z$  και του  $\partial^2 \theta / \partial z^2$ . Για την αριθμητική παραγωγή χρησιμοποιείται η τεχνική της κεντρικής παραγωγίσης. Έτσι σε έναν τυχαίο κόμβο  $i$  και στην τυχαία χρονική στιγμή  $t_i$  υπολογίζονται:

$$\begin{cases} \theta_i^{t_i} = \theta_i^{t_i} \\ \frac{\partial \theta_i^{t_i}}{\partial z} = \frac{\theta_{i+1}^{t_i} - \theta_{i-1}^{t_i}}{2dz} \\ \frac{\partial^2 \theta_i^{t_i}}{\partial z^2} = \frac{\theta_{i+1}^{t_i} - 2\theta_i^{t_i} + \theta_{i-1}^{t_i}}{dz^2} \end{cases} \quad (4.5)$$

Σημειώνεται ότι στην περίπτωση που υπάρχουν παραπάνω από ένα εδαφικά στρώματα, ο κόμβος της διεπιφάνειας των στρωμάτων λαμβάνει τιμή υδραυλικής αγωγιμότητας που προκύπτει από τον τύπο της κάθετης ροής σε δύο στρώματα:

$$K_i = \frac{\frac{dz_{i-1}}{K_{i-1}} + \frac{dz_{i+1}}{K_{i+1}}}{\frac{dz_{i-1}}{K_{i-1}} + \frac{dz_{i+1}}{K_{i+1}}}$$

Την χρονική στιγμή  $t=t_i$  η τιμή της υγρασίας σε κάθε κόμβο είναι  $\theta = \theta_i^{t_i}$  που είναι γνωστή από τον υπολογισμό του προηγούμενου χρονικού βήματος. Έτσι, υπολογίζεται το δεύτερο μέλος της εξίσωσης 4.4 που για λόγους σύμπτυξης συμβολίζεται ως  $A_i^{t_i}$ . Το πρώτο μέλος της εξίσωσης 4.4 αφορά την κλίση της εδαφικής υγρασίας συναρτήσει του χρόνου. Τη χρονική στιγμή  $t=t_{i+1}$  θα είναι:

$$\frac{\partial \theta_i^{t_{i+1}}}{\partial t} = \frac{\theta_i^{t_{i+1}} - \theta_i^{t_i}}{dt} \quad (4.6)$$

Επομένως η εξίσωση 4.4 μέσω των 4.5 και 4.6 επιλύεται ως εξής:

$$\frac{\theta_i^{t_{i+1}} - \theta_i^{t_i}}{dt} = A_i^{t_i} \Rightarrow \theta_i^{t_{i+1}} = A_i^{t_i} dt + \theta_i^{t_i} \quad (4.7)$$

υπολογίζοντας έτσι την εδαφική υγρασία του επόμενου χρονικού βήματος.

Η συνοριακή συνθήκη που χρησιμοποιείται στην επιφάνεια της ακόρεστης ζώνης είναι τύπου Dirichlet σταθερής τιμής της περιεκτικότητας της υγρασίας:

$$\theta_0^{t_i} = \text{σταθερό}$$

Η συνοριακή συνθήκη που χρησιμοποιείται στο κατώτερο επίπεδο της ακόρεστης ζώνης είναι τύπου Newmann σταθερής κλίσης της εδαφικής υγρασίας:

$$\frac{\partial \theta_n^{t_i}}{\partial z} = \text{σταθερό}$$

#### 4.1.1.3 Εξισώσεις μεταφοράς ρύπου

Η εξίσωση μεταφοράς ρύπου που χρησιμοποιείται είναι η 2.14:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta C + \rho S) = \frac{\partial}{\partial z} \left( \theta D \frac{\partial C}{\partial z} - q(\theta) C \right) \quad (4.8)$$

με:

$$q(\theta) = -K(\theta) \frac{\partial \Psi(\theta)}{\partial z} + K(\theta)$$

$$D = D_0 \tau + \lambda |u|$$

όπου  $u = q/\theta$ .

Επομένως το δεύτερο μέλος της εξίσωσης 4.8 που για λόγους σύμπτυξης συμβολίζεται ως  $B_i^{t_i}$  γίνεται:

$$B_i^{t_i} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \theta (D_0 \tau + \lambda |u|) \frac{\partial C}{\partial z} - \left( -K(\theta) \frac{\partial \Psi(\theta)}{\partial z} + K(\theta) \right) C \right) \quad (4.9)$$

Από την εξίσωση 4.9 φαίνεται ότι οι μεταβλητές που πρέπει να υπολογιστούν σε κάθε κόμβο ώστε να προσδιοριστεί η τιμή του δεύτερου μέλους της εξίσωσης 4.8 είναι οι:  $C$ ,  $\partial C / \partial z$ ,  $\partial^2 C / \partial z^2$ ,  $\theta$ ,  $\partial \theta / \partial z$  και  $\partial^2 \theta / \partial z^2$ . Οι τιμές της εδαφικής υγρασίας και οι παράγωγοί της σε κάθε κόμβο σε μια τυχαία χρονική στιγμή, υπολογίζονται κατά την επίλυση της εξίσωσης ροής (4.4). Με παρόμοιο τρόπο υπολογίζονται και οι παράγωγοι της συγκέντρωσης:

$$\begin{cases} C_i^{t_i} = C_i^{t_i} \\ \frac{\partial C_i^{t_i}}{\partial z} = \frac{C_{i+1}^{t_i} - C_{i-1}^{t_i}}{2 dz} \\ \frac{\partial^2 C_i^{t_i}}{\partial z^2} = \frac{C_{i+1}^{t_i} - 2C_i^{t_i} + C_{i-1}^{t_i}}{dz^2} \end{cases} \quad (4.10)$$

Το πρώτο μέλος της εξίσωσης 4.8 υπολογίζεται ως εξής:

$$\frac{\partial (\theta C + \rho S)_i^{t_{i+1}}}{\partial t} = \frac{(\theta C + \rho S)_i^{t_{i+1}} - (\theta C + \rho S)_i^{t_i}}{dt}$$

όμως  $S = kC^\eta$ :

$$\frac{\partial (\theta C + \rho k C^\eta)_i^{t_{i+1}}}{\partial t} = \frac{(\theta C + \rho k C^\eta)_i^{t_{i+1}} - (\theta C + \rho k C^\eta)_i^{t_i}}{dt} \quad (4.11)$$

Εάν το  $\eta$  στην εξίσωση 4.11 είναι ίσο με τη μονάδα, τότε αυτή μπορεί να παραγοντοποιηθεί ως προς τη συγκέντρωση και έτσι να επιλυθεί αναλυτικά όπως και στην περίπτωση της ροής. Στην περίπτωση όμως που  $\eta \neq 1$  η επίλυση γίνεται αριθμητικά. Η εξίσωση 4.8 μέσω των εξισώσεων 4.9 και 4.11 γίνεται:

$$F(C) \equiv (\theta C + \rho k C^\eta)_i^{t_{i+1}} - \left[ B_i^{t_i} dt + (\theta C + \rho k C^\eta)_i^{t_i} \right] = 0 \quad (4.12)$$

Η εξίσωση 4.12 λύνεται με χρήση της μεθόδου Newton-Raphson (NR). Από μία τυχαία αρχική τιμή της συγκέντρωσης για κάθε κόμβο  $C_{initial}$  υπολογίζεται η τιμή της συνάρτησης  $F(C)$ . Εάν η απόλυτη τιμή της  $F(C)$  (ή για ακριβέστερη σύγκλιση η τιμή της συνάρτησης  $(F(C))^2$ ) είναι μικρότερη από την τιμή του κριτηρίου σύγκλισης (π.χ.  $1e-20 \rightarrow 0$ ) η αρχική τιμή της συγκέντρωσης αποτελεί και την κατανομή της συγκέντρωσης στο εδαφικό προφίλ (η επιλογή μιας τυχαίας αρχικής τιμής συγκέντρωσης που να επιλύει το σύστημα είναι σχεδόν απίθανη). Εάν η τιμή είναι μεγαλύτερη, τότε για μια ελάχιστη μεταβολή της συγκέντρωσης κατά  $dC=1e-4$  υπολογίζεται αριθμητικά η παράγωγος της συνάρτησης  $F(C)$ . Η επόμενη τιμή της συγκέντρωσης που δοκιμάζεται (αν  $k$  το προηγούμενο βήμα της NR και  $k+1$  το τρέχον) είναι:

$$C_{k+1} = C_k - a \frac{F(C_k)}{\left( \frac{dF(C_k)}{dC} \right)}$$

όπου το  $a$  καλείται επιταχυντής. Το  $a$  παίρνει συνήθως τιμή (από 0 έως 1) τέτοια ώστε να ελαχιστοποιείται το σφάλμα  $(F(C_k, a_k))^2$  σε κάθε βήμα της NR. Αυτό ακολουθείται όμως σε ισχυρά μη γραμμικές εξισώσεις. Το σύστημα που πρέπει να επιλυθεί μετά τους υπολογισμούς του δεύτερου όρου της εξίσωσης 4.12 είναι γνησίως μονότονο (εκθετικό) και επομένως μία σταθερή τιμή του  $a$  μπορεί να δώσει αρκετά σύντομη και ακριβή λύση. Στην παρούσα εργασία προεπιλέγεται η τιμή 0.5, οπότε για το επόμενο βήμα της NR είναι:

$$C_{k+1} = C_k - 0.5 \frac{F(C_k)}{\left( \frac{dF(C_k)}{dC} \right)}$$

Η ίδια διαδικασία επαναλαμβάνεται έως ότου η τιμή  $(F(C_{k+1}))^2$  γίνει μικρότερη

από το κριτήριο σύγκλισης, οπότε και έχει υπολογιστεί η τιμή της συγκέντρωσης για κάθε κόμβο του συστήματος, σε οποιαδήποτε χρονική στιγμή.

Η συνοριακή συνθήκη που χρησιμοποιείται στην επιφάνεια της ακόρεστης ζώνης είναι τύπου Dirichlet σταθερής τιμής της συγκέντρωσης:

$$C_o^{t_i} = \text{σταθερό}$$

Η συνοριακή συνθήκη που χρησιμοποιείται στο κατώτερο επίπεδο της ακόρεστης ζώνης είναι τύπου Newmann σταθερής κλίσης:

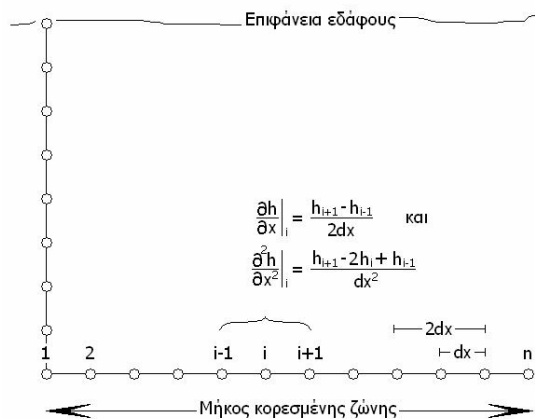
$$\frac{\partial C_n^{t_i}}{\partial z} = \text{σταθερό}$$

#### **4.1.2 Κορεσμένη ζώνη**

##### *4.1.2.1 Διακριτοποίηση*

Η διακριτοποίηση του εδαφικού προφίλ της κορεσμένης ζώνης, γίνεται με παρόμοιο τρόπο με την διακριτοποίηση της ακόρεστης. Περιλαμβάνει τη διαίρεση του συνολικού μήκους της κορεσμένης ζώνης με το στοιχειώδες μήκος, την τιμή του οποίου εισαγάγει ο χρήστης. Το πλήθος των κόμβων ( $n$ ) που παράγονται, προσαυξάνεται κατά δύο, έναν στην αρχή και έναν στο τέλος του εδαφικού προφίλ. Οι τιμές των μεγεθών στους δύο αυτούς ακριανούς κόμβους αντιστοιχούν στις συνοριακές συνθήκες.

Η πρώτη παράγωγος του υδραυλικού ύψους συναρτήσει του μήκους στον κόμβο  $i$  (που αποτελεί και το βασικό μέγεθος υπολογισμού κατά την προσομοίωση της ροής της κορεσμένης ζώνης), υπολογίζεται αριθμητικά από το πηλίκο της διαφοράς υδραυλικού ύψους του κόμβου  $i+1$  με αυτή του κόμβου  $i-1$  με τη μεταξύ τους απόσταση. Η δεύτερη παράγωγος στον ίδιο κόμβο υπολογίζεται αριθμητικά από το πηλίκο της διαφοράς της τιμής της πρώτης παραγώγου υδραυλικού ύψους του σημείου που βρίσκεται στο μέσο μεταξύ των κόμβων  $i$  και  $i+1$  από αυτή του σημείου που βρίσκεται στο μέσο μεταξύ των κόμβων  $i-1$  και  $i$ , με την μεταξύ τους απόσταση (Σχήμα 4.1).



**Σχήμα 4.2:** Διακριτοποίηση και υπολογισμός πρώτων και δεύτερων παραγώγων.

#### 4.1.2.2 Εξισώσεις ροής ύδατος

Η εξίσωση ροής που χρησιμοποιείται για την κορεσμένη ζώνη είναι η 2.38 η οποία ως προς  $\partial h / \partial t$  είναι ( $S_{\text{κορεσμένης}} = n_{ef}$ ):

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( K \frac{\partial h}{\partial x} \right) + Q \right) \frac{1}{n_{ef}} \quad (4.13)$$

Από την παραπάνω εξίσωση φαίνεται ότι η μοναδική εξαρτημένη μεταβλητή είναι το υδραυλικό ύψος  $h$ , ενώ η εισροή της επιπρόσθετης παροχής  $Q$  σε κάθε κόμβο της κορεσμένης ζώνης αφορά την παροχή που προέρχεται από τον τελευταίο κόμβο της ακόρεστης ζώνης, σε κάθε χρονικό βήμα. Η παραγωγή του δεύτερου μέλους της εξίσωσης 4.13 οδηγεί ουσιαστικά σε μορφή που άγνωστες μεταβλητές είναι το  $h$ , και η πρώτη και δεύτερη παράγωγος του  $h$  ως προς το μήκος  $x$ . Έτσι, για την επίλυση της ροής αρκεί σε κάθε χωρικό βήμα να υπολογιστούν οι τιμές των  $h$ ,  $\partial h / \partial x$  και  $\partial^2 h / \partial x^2$ . Για την αριθμητική παραγωγή χρησιμοποιείται, και στην κορεσμένη ζώνη, η τεχνική της κεντρικής παραγωγής. Έτσι σε έναν τυχαίο κόμβο  $i$  και στην τυχαία χρονική στιγμή  $t_i$  υπολογίζονται:

$$\begin{cases} h_i^{t_i} = h_i^{t_i} \\ \frac{\partial h_i^{t_i}}{\partial x} = \frac{h_{i+1}^{t_i} - h_{i-1}^{t_i}}{2dx} \\ \frac{\partial^2 h_i^{t_i}}{\partial x^2} = \frac{h_{i+1}^{t_i} - 2h_i^{t_i} + h_{i-1}^{t_i}}{dx^2} \end{cases} \quad (4.14)$$

Έτσι, υπολογίζεται το δεύτερο μέλος της εξίσωσης 4.13 που για λόγους σύμπτυξης συμβολίζεται ως  $A_i^{t_i}$ . Το πρώτο μέλος της εξίσωσης 4.13 αφορά την κλίση του υδραυλικού ύψους συναρτήσει του χρόνου. Τη χρονική στιγμή  $t=t_{i+1}$  θα είναι:

$$\frac{\partial h_i^{t_{i+1}}}{\partial t} = \frac{h_{i+1}^{t_{i+1}} - h_i^{t_i}}{dt} \quad (4.15)$$

Επομένως η εξίσωση 4.13 μέσω των 4.14 και 4.15 επιλύεται ως εξής:

$$\frac{h_{i+1}^{t_{i+1}} - h_i^{t_i}}{dt} = A_i^{t_i} \Rightarrow h_{i+1}^{t_{i+1}} = A_i^{t_i} dt + h_i^{t_i} \quad (4.16)$$

υπολογίζοντας έτσι τα υδραυλικά ύψη των κόμβων του επόμενου χρονικού βήματος.

Τη χρονική στιγμή  $t=0$  η τιμή του υδραυλικού ύψους σε κάθε κόμβο, υπολογίζεται από την εξίσωση ροής 4.13 για σταθερές συνθήκες, και με βάση τα δεδομένα αρχικά υδραυλικά ύψη για τους συνοριακούς κόμβους που εισάγονται από τον χρήστη. Θεωρούμε δηλαδή  $\partial h / \partial t = 0$ . Οπότε η τιμή του  $h$  σε κάθε κόμβο δίνεται από τη σχέση:

$$h_i^{t_i} = \sqrt{(h_o^{t_i})^2 - \frac{(h_o^{t_i})^2 - (h_L^{t_i})^2}{L} x_i}$$

Η συνοριακή συνθήκη που χρησιμοποιείται στο σημείο  $x=0$  και  $x=L$  της κορεσμένης ζώνης (στον πρώτο και τελευταίο κόμβο της διακριτοποίησης) είναι τύπου Newmann σταθερής κλίσης του υδραυλικού ύψους:

$$\begin{cases} \frac{\partial h_o^{t_i}}{\partial x} = \text{σταθερό} \\ \frac{\partial h_n^{t_i}}{\partial x} = \text{σταθερό} \end{cases}$$



#### 4.1.2.3 Εξισώσεις μεταφοράς ρύπου

Η εξίσωση μεταφοράς ρύπου που χρησιμοποιείται για την κορεσμένη ζώνη είναι η 2.60 ενώ για το συντελεστή υδροδυναμικής διασποράς χρησιμοποιούνται οι εξισώσεις 2.41 και 2.47. Οι εξισώσεις που προκύπτουν είναι:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{B_d k}{n} \frac{\partial C^\eta}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (4.17)$$

$$D_L = a_L v_x + \lambda D \quad (4.18)$$

Από την εξίσωση 4.17 φαίνεται ότι οι μεταβλητές που πρέπει να υπολογιστούν σε κάθε κόμβο ώστε να προσδιοριστεί η τιμή του δεύτερου μέλους της εξίσωσης 4.17 είναι οι:  $C$ ,  $\partial C / \partial x$ ,  $\partial^2 C / \partial x^2$ . Οι τιμές των συγκεντρώσεων και των παραγώγων τους σε κάθε κόμβο σε μια τυχαία χρονική στιγμή, υπολογίζονται ως εξής:

$$\begin{cases} C_i^{t_i} = C_i^{t_i} \\ \frac{\partial C_i^{t_i}}{\partial x} = \frac{C_{i+1}^{t_i} - C_{i-1}^{t_i}}{2 \Delta x} \\ \frac{\partial^2 C_i^{t_i}}{\partial x^2} = \frac{C_{i+1}^{t_i} - 2C_i^{t_i} + C_{i-1}^{t_i}}{\Delta x^2} \end{cases} \quad (4.19)$$

Έτσι, υπολογίζεται το δεύτερο μέλος της εξίσωσης 4.17 που για λόγους σύμπτυξης συμβολίζεται ως  $B_i^{t_i}$ . Το πρώτο μέλος της εξίσωσης 4.17 αφορά την κλίση της συγκέντρωσης συναρτήσει του χρόνου. Τη χρονική στιγμή  $t=t_{i+1}$  θα είναι:

$$\frac{\partial C_i^{t_{i+1}}}{\partial t} = \frac{C_i^{t_{i+1}} + \frac{B_d k}{n} C_i^{\eta, t_{i+1}} - C_i^{t_i} - \frac{B_d k}{n} C_i^{\eta, t_i}}{\Delta t} \quad (4.20)$$

Επομένως η εξίσωση 4.17 μέσω των 4.19 και 4.20 επιλύεται ως εξής:

$$\begin{aligned} \frac{C_i^{t_{i+1}} + \frac{B_d k}{n} C_i^{\eta, t_{i+1}} - C_i^{t_i} - \frac{B_d k}{n} C_i^{\eta, t_i}}{\Delta t} &= B_i^{t_i} \Rightarrow \\ C_i^{t_{i+1}} + \frac{B_d k}{n} C_i^{\eta, t_{i+1}} &= B_i^{t_i} \Delta t + C_i^{t_i} + \frac{B_d k}{n} C_i^{\eta, t_i} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Εάν το  $\eta$  στην εξίσωση 4.16 είναι ίσο με τη μονάδα, τότε αυτή μπορεί να παραγοντοποιηθεί ως προς τη συγκέντρωση και έτσι να επιλυθεί αναλυτικά όπως και στην περίπτωση της ροής. Στην περίπτωση όμως που  $\eta \neq 1$  η επίλυση γίνεται αριθμητικά όπως και στην ακόρεστη ζώνη. Η εξίσωση 4.21 γίνεται:

$$F(C) \equiv \left[ C_i + \frac{B_d k}{n} C_i^\eta \right]^{t_{i+1}} - \left[ B_i dt + C_i + \frac{B_d k}{n} C_i^\eta \right]^{t_i} \quad (4.22)$$

Η εξίσωση 4.22 λύνεται με χρήση της μεθόδου Newton-Raphson (NR). Από μία τυχαία αρχική τιμή της συγκέντρωσης για κάθε κόμβο  $C_{initial}$  υπολογίζεται η τιμή της συνάρτησης  $F(C)$ . Εάν η απόλυτη τιμή της  $F(C)$  (ή για ακριβέστερη σύγκλιση η τιμή της συνάρτησης  $(F(C))^2$ ) είναι μικρότερη από την τιμή του κριτηρίου σύγκλισης (π.χ.  $1e-20 \rightarrow 0$ ) η αρχική τιμή της συγκέντρωσης αποτελεί και την κατανομή της συγκέντρωσης στο εδαφικό προφίλ (η επιλογή μιας τυχαίας αρχικής τιμής συγκέντρωσης που να επιλύει το σύστημα είναι σχεδόν απίθανη). Εάν η τιμή είναι μεγαλύτερη, τότε για μια ελάχιστη μεταβολή της συγκέντρωσης κατά  $dC=1e-4$  υπολογίζεται αριθμητικά η παράγωγος της συνάρτησης  $F(C)$ . Η επόμενη τιμή της συγκέντρωσης που δοκιμάζεται (αν  $k$  το προηγούμενο βήμα της NR και  $k+1$  το τρέχον) είναι:

$$C_{k+1} = C_k - \sigma \frac{F(C_k)}{\left( \frac{dF(C_k)}{dC} \right)}$$

Στην κορεσμένη ζώνη, παρόμοια με την ακόρεστη, το σύστημα που πρέπει να επιλυθεί μετά τους υπολογισμούς του δεύτερου όρου της εξίσωσης 4.22 είναι γνησίως μονότονο (εκθετικό) και επομένως μία σταθερή τιμή του  $\sigma$  μπορεί να δώσει αρκετά σύντομη και ακριβή λύση. Ομοίως με την περίπτωση της ακόρεστης ζώνης προεπιλέγεται η τιμή 0.5, οπότε για το επόμενο βήμα της NR είναι:

$$C_{k+1} = C_k - 0.5 \frac{F(C_k)}{\left( \frac{dF(C_k)}{dC} \right)}$$

Η ίδια διαδικασία επαναλαμβάνεται έως ότου η τιμή  $(F(C_{k+1}))^2$  γίνει μικρότερη από το κριτήριο σύγκλισης, οπότε και έχει υπολογιστεί η τιμή της συγκέντρωσης

για κάθε κόμβο του συστήματος, σε οποιαδήποτε χρονική στιγμή.

Η συνοριακή συνθήκη που χρησιμοποιείται στο σημείο  $x=0$  της κορεσμένης ζώνης (στον πρώτο κόμβο της διακριτοποίησης) είναι τύπου Dirichlet σταθερής τιμής της συγκέντρωσης η οποία για κάθε χρονικό βήμα είναι η συγκέντρωση που εισέρχεται από τον τελευταίο κόμβο της ακόρεστης ζώνης:

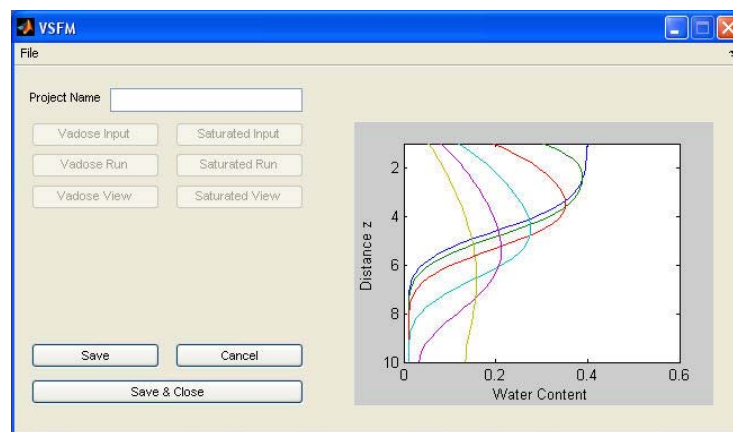
$$C_0^{t_i} = \text{σταθερό}$$

Η συνοριακή συνθήκη που χρησιμοποιείται στο σημείο  $x=L$  της κορεσμένης ζώνης (στον τελευταίο κόμβο της διακριτοποίησης) είναι τύπου Newmann σταθερής κλίσης της συγκέντρωσης:

$$\frac{\partial C_n^{t_i}}{\partial x} = \text{σταθερό}$$

## 4.2 Περιγραφή παραθυρικού περιβάλλοντος

Όπως έχει προαναφερθεί, για την ανάπτυξη του μοντέλου χρησιμοποιήθηκε το μαθηματικό λογισμικό πακέτο «Matlab 7.0.4». Για την ευκολότερη χρήση του αλλά και την ευκολότερη διαχείριση των δεδομένων, ο βασικός κώδικας συνοδεύεται από ένα παραθυρικό περιβάλλον κατασκευασμένο στην ίδια γλώσσα. Στο Σχήμα 4. φαίνεται το αρχικό παράθυρο διαλόγου του προγράμματος που ονομάστηκε VSFM (από τα αρχικά των Vadose Saturated Flow Model).



**Σχήμα 4.3:** Αρχικό παράθυρο διαλόγου του προγράμματος VSFM.

Όπως είναι φανερό, για τη μοντελοποίηση καθεμιάς από τις περιοχές του υδροφορέα (ακόρεστη και κορεσμένη ζώνη) υπάρχει μια ομάδα επιλογών που αφορούν την εισαγωγή δεδομένων, την επίλυση και την εμφάνιση των αποτελεσμάτων. Έτσι, για την ακόρεστη ζώνη δίνονται οι επιλογές:

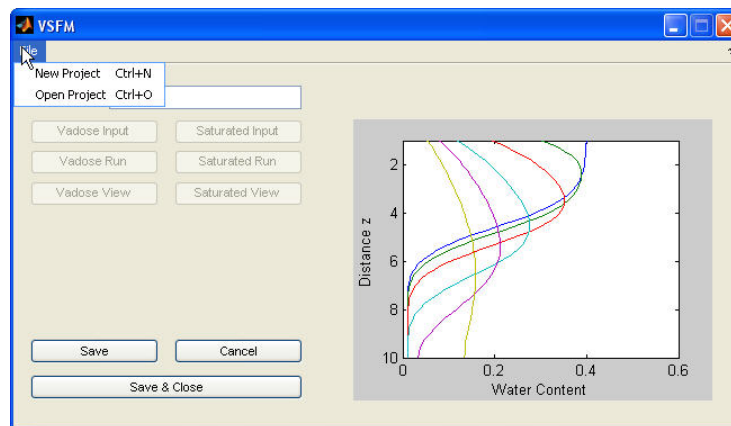
1. Vadose Input
2. Vadose Run
3. Vadose View

και αντίστοιχα για την κορεσμένη:

1. Saturated Input
2. Saturated Run
3. Saturated View

Στο κάτω μέρος του παραθύρου διαλόγου δίνονται επίσης τρεις επιλογές για αποθήκευση του μοντέλου κατά τη διάρκεια της μοντελοποίησης (*Save*), ακύρωση των αλλαγών και έξοδος από το πρόγραμμα (*Cancel*) και τέλος για αποθήκευση του μοντέλου ή των αλλαγών και ταυτόχρονη έξοδος από το πρόγραμμα (*Save & Close*).

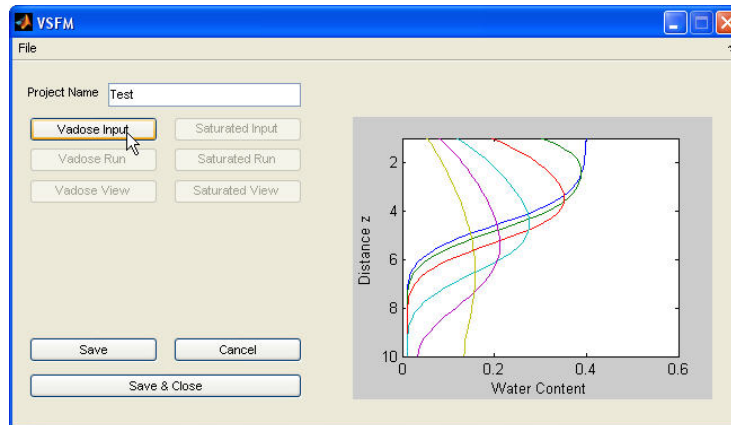
Στο σημείο αυτό ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να επιλέξει μεταξύ ενός νέου μοντέλου και κάποιου από τα ήδη αποθηκευμένα από το μενού *File*, όπως φαίνεται στο Σχήμα 4..



**Σχήμα 4.4:** Επιλογή μεταξύ νέου μοντέλου, ή ήδη αποθηκευμένου.

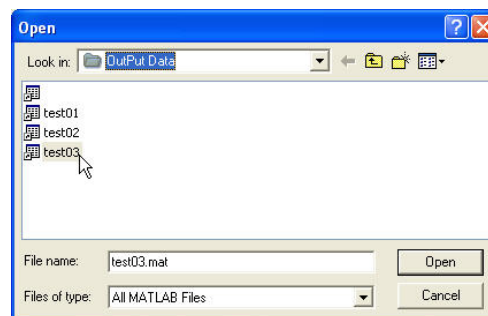
Στο Σχήμα 4. έχει επιλεγεί η δημιουργία ενός νέου μοντέλου (*New project*). Στο

πάνω μέρος του αρχικού παραθύρου διαλόγου, υπάρχει ένα πεδίο κειμένου στο οποίο εισάγεται το όνομα του νέου μοντέλου ενώ αμέσως ενεργοποιείται η επιλογή *Vadose Input*, ώστε να ξεκινήσει η εισαγωγή των δεδομένων για την ακόρεστη ζώνη. Σημειώνεται ότι οι υπόλοιπες επιλογές είναι ανενεργές και καθεμία από αυτές ενεργοποιείται με την ολοκλήρωση του αμέσως προηγούμενου βήματος.

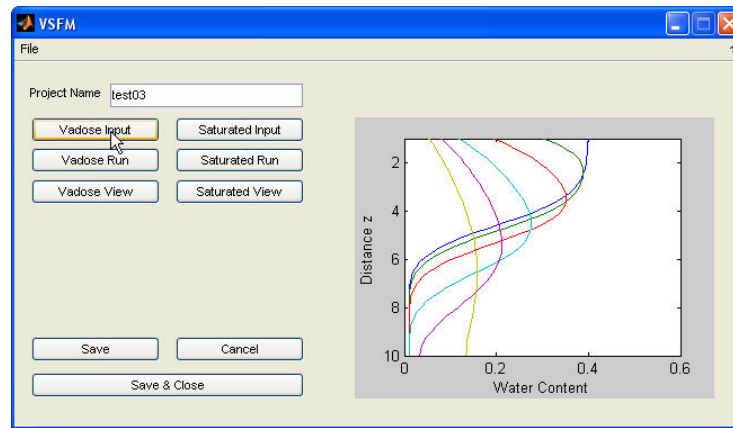


**Σχήμα 4.5:** Δημιουργία νέου μοντέλου και επιλογή εισαγωγής δεδομένων.

Στην περίπτωση που επιλέγεται η επίλυση ενός από τα ήδη αποθηκευμένα μοντέλα, εμφανίζεται ένα νέο παράθυρο διαλόγου (Σχήμα 4.), όπου επιλέγεται το αρχείο που αντιστοιχεί στο μοντέλο. Στο αρχικό παράθυρο διαλόγου πλέον είναι ενεργές όλες οι επιλογές που αφορούν την επίλυση και για την ακόρεστη αλλά και για την κορεσμένη ζώνη (Σχήμα 4.).



**Σχήμα 4.6:** Επιλογή και «άνοιγμα» ήδη αποθηκευμένου μοντέλου.



**Σχήμα 4.7:** Άνοιγμα ήδη αποθηκευμένου μοντέλου και επιλογή εισαγωγής δεδομένων.

#### 4.2.1 Ακόρεστη ζώνη

##### 4.2.1.1 Εισαγωγή δεδομένων ροής

Για την εισαγωγή των δεδομένων που απαιτούνται για την επίλυση του μοντέλου ανοίγει ένα νέο παράθυρο διαλόγου με τις εξής επιλογές (Σχήμα 4.):

1. Εδαφικά χαρακτηριστικά (*Soil Characteristics*)
2. Χημικά χαρακτηριστικά (*Chemical Characteristics*)
3. Αριθμητικές παράμετροι (*Numerical Parameters*)
4. Αρχικές και συνοριακές συνθήκες (*Initial & Boundary Conditions*)

Στις ενότητες που ακολουθούν αναλύονται περαιτέρω οι παραπάνω επιλογές.

##### Εισαγωγή εδαφικών χαρακτηριστικών

Όπως φαίνεται και από το Σχήμα 4., στο παράθυρο διαλόγου αυτό, εισάγονται τα εδαφικά χαρακτηριστικά της εδαφικής τομής που εξετάζεται, σε μορφή πίνακα. Για καθέναν από τους επιμέρους εδαφικούς σχηματισμούς αυτά είναι:

1. Το όνομά του (*Name*)
2. Το πάχος του σε cm (*Depth*)
3. Η υδραυλική αγωγιμότητά του σε cm/h (*Ks*)
4. Η ελάχιστη τιμή περιεκτικότητας ύδατος σε  $\text{cm}^3/\text{cm}^3$  (*Theta\_r*)
5. Η ογκομετρική περιεκτικότητα ύδατος στην κατάσταση κορεσμού σε  $\text{cm}^3/\text{cm}^3$  (*Theta\_s*)
6. Το τριχοειδές ύψος απορρόφησης όπου  $\theta=\theta_s$  σε cm (*Psi\_b*)

7. Πειραματική παράμετρος ( $\lambda$ ) που αφορά την κατανομή του μεγέθους των πόρων
8. Πειραματική παράμετρος ( $n$ ) η οποία εξαρτάται από τον τύπο του εδάφους.

[illegible]

**Σχήμα 4.8:** Εισαγωγή δεδομένων (εδαφικών χαρακτηριστικών) ακόρεστης ζώνης.

Στο κάτω αριστερό τμήμα του παραθύρου αυτού εμφανίζεται το πάχος του εδαφικού προφίλ που αντιστοιχεί στο άθροισμα του πάχους των επιμέρους εδαφικών σχηματισμών και υπολογίζεται αυτόματα, καθώς και το όνομα του αρχείου. Κάτω δεξιά δίνονται οι επιλογές αποθήκευσης (*Save*), αποθήκευσης και ταυτόχρονης εξόδου από την εισαγωγή δεδομένων (*Save & Close*), καθώς και ακύρωσης των αλλαγών και εξόδου (*Cancel*). Τα παραπάνω πεδία είναι κοινά για όλα τα παράθυρα εισαγωγής δεδομένων.

## Εισαγωγή χημικών χαρακτηριστικών

Τα χημικά χαρακτηριστικά αναφέρονται στο ρύπο που εισέρχεται στην ατμόσφαιρα και έπειτα στην κορεσμένη ζώνη. Αυτά, εισάγονται στο νέο παράθυρο διαλόγου που εμφανίζεται με την επιλογή *Chemical Characteristics* (Σχήμα 4.) και είναι:

1. Το όνομά του (*Name of contaminant*)
2. Ο συντελεστής διάχυσης του ρύπου στο νερό σε  $\text{cm}^2/\text{h}$  (*Diffusion Coefficient  $D_0$* )

3. Ο παράγοντας στρεβλότητας (*Tortuosity factor*  $\tau$ )
4. Συντελεστής ικανότητας διασποράς σε cm (*Lamda dispersivity*  $\lambda$ )
5. Ογκομετρική πυκνότητα σε g/cm<sup>3</sup> (*Bulk Density*  $d_b$ )
6. Εμπειρικός συντελεστής κατανομής ρύπου (*Distribution coefficient*  $\eta$ )
7. Εμπειρικός συντελεστής κατανομής ρύπου (*Heta coefficient*  $\eta$ )

The screenshot shows the 'Vadoso\_input' window with the 'Chemical Characteristics' tab selected. It contains a table with the following data:

| Parameter                | Symbol and units            | Value   |
|--------------------------|-----------------------------|---------|
| Name of contaminant      |                             | unknown |
| Diffusion coefficient    | $D_0$ (cm <sup>2</sup> /hr) | 0.08    |
| Tortuosity factor        | $\tau$                      | 0.6     |
| Lamda dispersivity       | $\lambda$ (cm)              | 1.026   |
| Bulk density             | $d_b$ (kg/ccm)              | 1.35    |
| Distribution coefficient | $k$                         | 0.01    |
| Heta coefficient         | $\eta$                      | 1       |

Below the table, there is a field for 'Total Depth of Soil (cm):' with the value '10' entered. At the bottom, there is a 'Project name:' field with 'test03' and buttons for 'Save', 'Save & Close', and 'Cancel'.

**Σχήμα 4.9:** Εισαγωγή χημικών χαρακτηριστικών ρύπου που εισέρχεται στην ακόρεστη ζώνη.

#### Εισαγωγή αριθμητικών παραμέτρων

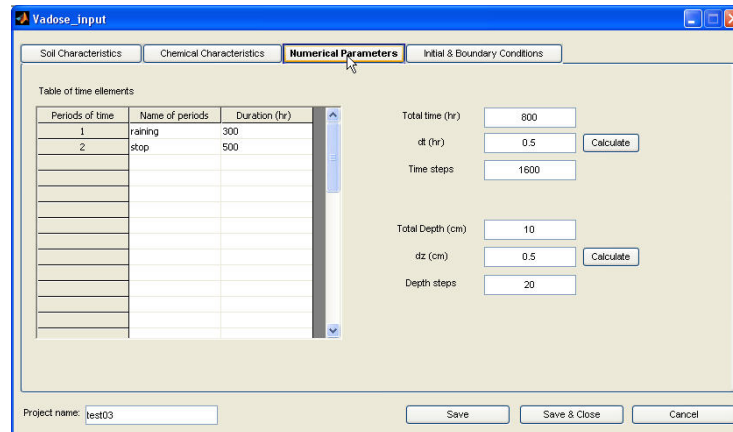
Επιλέγοντας την εντολή *Numerical Parameters* εισάγονται οι αριθμητικές παράμετροι της επίλυσης (Σχήμα 4.). Στο αριστερό μέρος αυτού του παραθύρου διαλόγου εμφανίζεται ένας πίνακας στον οποίο εισάγονται οι χρονικές περίοδοι διαβροχής και η διάρκεια τους (σε hr). Στα δεξιά υπολογίζεται αυτόματα ο συνολικός χρόνος για τον οποίο εξετάζεται το μοντέλο (*Total time* σε hr). Αμέσως μετά, εισάγεται από το χρήστη το στοιχειώδες χρονικό διάστημα για το οποίο θα υπολογίζονται οι διάφορες παράμετροι της επίλυσης ( $dt$  σε hr), ενώ με την επιλογή *Calculate* υπολογίζεται ο αριθμός των χρονικών βημάτων στα οποία διαιρείται η συνολική χρονική περίοδος που εξετάζεται (*Time steps*).

Αντίστοιχα δίνονται και οι παράμετροι που αφορούν τα χωρικά στοιχεία της επίλυσης. Έτσι, το συνολικό πάχος της εδαφικής τομής (*Total depth* σε cm) έχει υπολογιστεί αυτόματα από το παράθυρο εισαγωγής των εδαφικών χαρακτηριστικών. Στο σημείο αυτό εισάγεται από το χρήστη το στοιχειώδες διάστημα μήκους για το οποίο θα υπολογίζονται οι διάφορες παράμετροι της



επίλυσης ( $dx$  σε cm). Με την επιλογή *Calculate* υπολογίζεται ο αριθμός των βημάτων απόστασης στα οποία διαιρείται το συνολικό πάχος της εδαφικής τομής (*Depth steps*).

Σημειώνεται εδώ ότι κάθε φορά που ο χρήστης μεταβάλλει το στοιχειώδες χρονικό βήμα ή διάστημα μήκους, πρέπει να υπολογίζονται εκ νέου τα συνολικά χρονικά βήματα και βήματα απόστασης προκειμένου να πραγματοποιηθεί η επίλυση.



**Σχήμα 4.10:** Εισαγωγή αριθμητικών παραμέτρων επίλυσης για την ακόρεστη ζώνη.

## Εισαγωγή αρχικών και συνοριακών συνθηκών

Με την επιλογή *Initial & Boundary conditions* εισάγονται οι αρχικές και συνοριακές συνθήκες του προβλήματος προκειμένου να πραγματοποιηθεί η επίλυση (Σχήμα 4.2). Στο παράθυρο διαλόγου που εμφανίζεται, υπάρχουν δύο πίνακες. Στον αριστερό πίνακα εισάγονται οι αρχικές συνθήκες για κάθε εδαφικό σχηματισμό που είναι:

1. Περιεκτικότητα σε νερό  $W_c$  σε  $\text{cm}^3/\text{cm}^3$  (*Water Content*).
2. Συγκέντρωση  $C$  σε  $\text{mg/l}$  (*Concentration*).

Στα δεξιά εισάγονται οι συνοριακές συνθήκες για κάθε χρονική περίοδο διαβροχής που εξετάζεται και οι οποίες είναι:

1. Επιφανειακή περιεκτικότητα σε νερό  $W_c$  σε  $\text{cm}^3/\text{cm}^3$  (*Surface  $W_c$* ).
2. Επιφανειακή συγκέντρωση  $C$  σε  $\text{mg/l}$  (*Surface  $C$* ).

Στο κάτω μέρος των δύο πινάκων εμφανίζονται και πάλι το συνολικό πάχος της εδαφικής τομής καθώς και η συνολική χρονική διάρκεια για την οποία εξετάζεται το πρόβλημα.

**Vadoses\_input**

Soil Characteristics   Chemical Characteristics   Numerical Parameters   **Initial & Boundary Conditions**

**Initial Conditions**

| Layer No | Layer Name | Water Content<br>WC (ccm/ccm) | Concentration<br>C (mg/l) |
|----------|------------|-------------------------------|---------------------------|
| 1        | loamy sand | 0.06                          | 0                         |

**Boundary Conditions**

| Period No | Period Name | Surface WC<br>WC (ccm/ccm) | Surface C<br>C (mg/l) |
|-----------|-------------|----------------------------|-----------------------|
| 1         | raining     | 0.4                        | 0.00025               |
| 2         | stop        | 0.06                       | 0                     |

Total Depth of Soil (cm):       Total Time (hr):

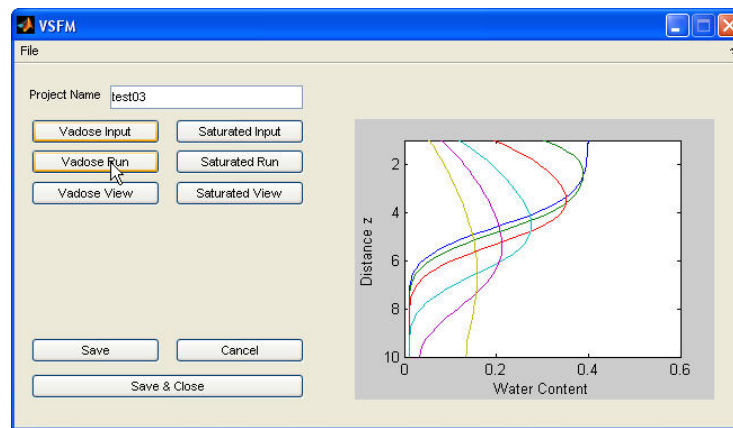
Project name:            

**Σχήμα 4.2:** Εισαγωγή αρχικών και συνοριακών συνθηκών για την ακόρεστη ζώνη.

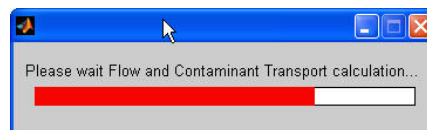
Με την ολοκλήρωση της διαδικασίας εισαγωγής δεδομένων επιλέγεται η εντολή *Save & Close* με την οποία αποθηκεύονται όλα τα δεδομένα σε αρχείο και γίνεται έξοδος του χρήστη από το συγκεκριμένο υποπρόγραμμα.

#### 4.2.1.2 Επίλυση μοντέλου ροής

Μετά από την εισαγωγή των αρχικών και συνοριακών συνθηκών ακολουθεί η επίλυση του μοντέλου με την επιλογή *Vadoses Run* από το αρχικό παράθυρο διαλόγου του προγράμματος όπως φαίνεται από το Σχήμα 4.3. Κατά τη διάρκεια της επίλυσης εμφανίζεται ένα παράθυρο μηνύματος (Σχήμα 4.4) το οποίο ενημερώνει το χρήστη για την χρονική πορεία της διαδικασίας.



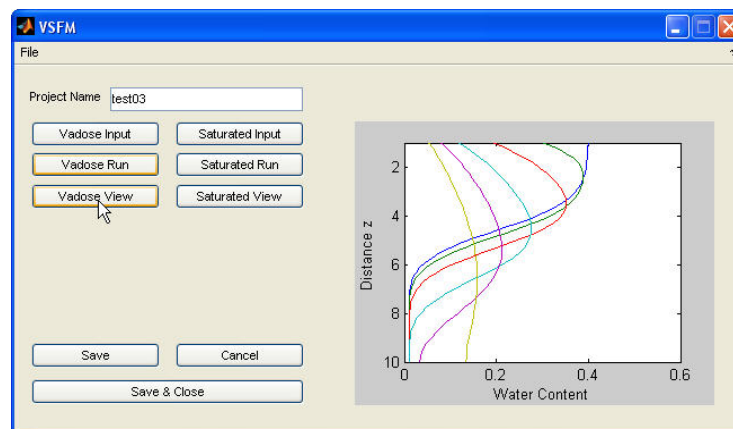
**Σχήμα 4.3:** Επίλυση του μοντέλου ροής στην ακόρεστη ζώνη.



**Σχήμα 4.4:** Παράθυρο μηνύματος που εμφανίζεται κατά την επίλυση του μοντέλου.

#### 4.2.1.3 Εμφάνιση αποτελεσμάτων

Από το αρχικό παράθυρο διαλόγου επιλέγεται η εντολή *Vadose View* (Σχήμα 4.5) προκειμένου να εμφανιστούν τα αποτελέσματα της επίλυσης.

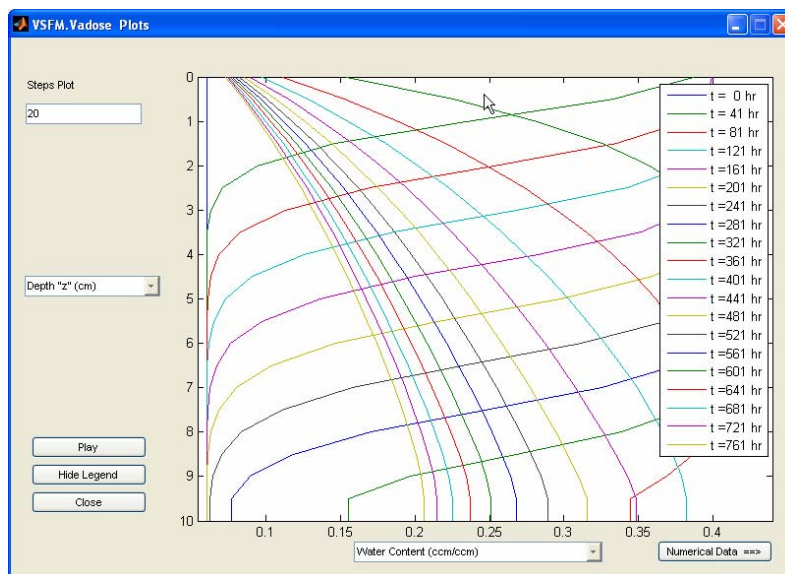


**Σχήμα 4.5:** Επιλογή εμφάνισης αποτελεσμάτων επίλυσης.

Στο παράθυρο αποτελεσμάτων (Σχήμα 4.6), ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να επιλέξει ποιες παράμετροι επιθυμεί να παρασταθούν γραφικά κατά μήκος του εδαφικού προφίλ. Αρχικά επιλέγει τον αριθμό των καμπυλών (χρονικών

βημάτων), με εισαγωγή της κατάλληλης τιμής στο πεδίο *Steps Plot*. Σε περίπτωση που εισαχθεί τιμή μεγαλύτερη του 20, το πρόγραμμα προειδοποιεί το χρήστη ότι δεν μπορεί να εμφανίσει το υπόμνημα του διαγράμματος και αντί υπομνήματος εμφανίζεται το μήνυμα "Lines > 20!".

Στο κάτω αριστερό μέρος του παραθύρου υπάρχουν ακόμη δύο επιλογές για την απόκρυψη του υπομνήματος (*Hide Legend*) και για το κλείσιμο του παραθύρου των αποτελεσμάτων (*Close*). Σε περίπτωση που επιλεγεί η απόκρυψη του υπομνήματος η εντολή αλλάζει σε "*Show Legend*" προκειμένου αυτό να επανεμφανιστεί (Σχήμα 4.7). Η επιλογή "Numerical Data" παρουσιάζει τα αριθμητικά αποτελέσματα σε κάθε κόμβο και για κάθε χρονικό βήμα σε μορφή πίνακα.



**Σχήμα 4.6:** Παράθυρο αποτελεσμάτων επίλυσης.

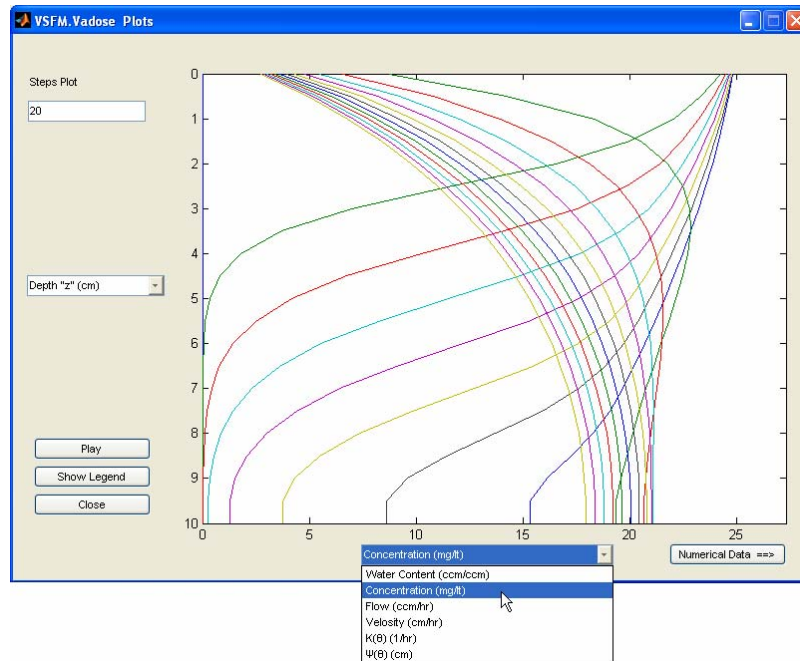
Στον κατακόρυφο άξονα (Σχήμα 4.6), ο χρήστης μπορεί να επιλέξει μεταξύ δύο παραμέτρων:

1. Βάθος  $z$  σε cm (*Depth "z"*).
2. Περιεκτικότητα σε νερό  $\theta$  σε  $\text{cm}^3/\text{cm}^3$  (*Water Content "θ"*).

Στο Σχήμα 4.7 απεικονίζονται οι επιλογές παραμέτρων που έχει ο χρήστης για εμφάνιση στον οριζόντιο άξονα του διαγράμματος (κατανομή τους κατά μήκος

του εδαφικού προφίλ) και οι οποίες είναι:

1. Περιεκτικότητα σε νερό  $\theta$  σε  $\text{cm}^3/\text{cm}^3$  (*Water Content " $\theta$ "*).
2. Συγκέντρωση  $C$  σε  $\text{mg/l}$  (*Concentration*).
3. Παροχή  $q$  ανά μονάδα επιφάνειας σε  $\text{cm}^3/\text{hr}$  (*Flow*).
4. Ταχύτητα ροής  $v$  σε  $\text{cm/hr}$  (*Velocity*).
5. Υδραυλική αγωγιμότητα  $K(\theta)$  σε  $1/\text{hr}$ .
6. Τριχοειδής πίεση  $\Psi(\theta)$  σε  $\text{cm}$ .



**Σχήμα 4.7:** Επιλογή παραμέτρων για τον οριζόντιο άξονα του διαγράμματος στο παράθυρο αποτελεσμάτων επίλυσης.

## 4.2.2 Κορεσμένη ζώνη

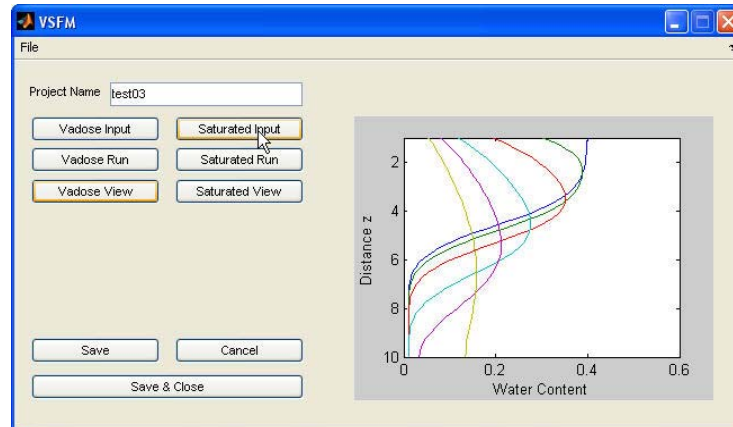
### 4.2.2.1 Εισαγωγή δεδομένων ροής

Για την εισαγωγή των δεδομένων ροής για την κορεσμένη ζώνη που απαιτούνται για την επίλυση του μοντέλου επιλέγεται η εντολή *Saturated Input* από το αρχικό παράθυρο διαλόγου (Σχήμα 4.8) και ανοίγει ένα νέο παράθυρο διαλόγου (Σχήμα 4.9).

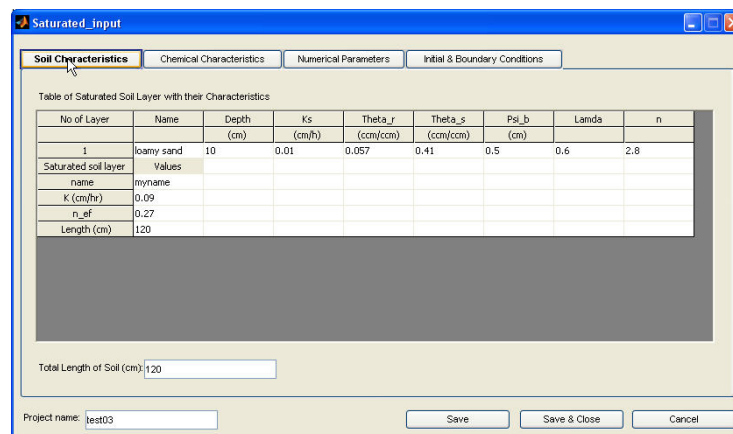
### Εισαγωγή εδαφικών χαρακτηριστικών

Όπως φαίνεται και από το Σχήμα 4.9, οι ιδιότητες του κορεσμένου εδαφικού σχηματισμού συμπληρώνονται κατακόρυφα στον πίνακα που σε προηγούμενη ενότητα συμπληρώθηκαν οι ιδιότητες του ακόρεστου. Οι ιδιότητες που αφορούν τον κορεσμένο εδαφικό σχηματισμό είναι:

1. Το όνομά του (*Name*)
2. Η υδραυλική αγωγιμότητά του σε cm/h (*K*)
3. Το μήκος του σε cm (*Length*)
4. Το ενεργό πορώδες (*n<sub>ef</sub>*)



**Σχήμα 4.8:** Επιλογή εισαγωγής δεδομένων για την κορεσμένη ζώνη.



**Σχήμα 4.9:** Εισαγωγή δεδομένων (εδαφικών χαρακτηριστικών) κορεσμένης ζώνης.

Στο κάτω αριστερό τμήμα του παραθύρου αυτού εμφανίζεται το μήκος του

εδαφικού προφίλ (που αντιστοιχεί στο άθροισμα των μηκών των επιμέρους εδαφικών σχηματισμών και υπολογίζεται αυτόματα), καθώς και το όνομα του αρχείου. Κάτω δεξιά δίνονται οι επιλογές αποθήκευσης (*Save*), αποθήκευσης και ταυτόχρονης εξόδου από την εισαγωγή δεδομένων (*Save & Close*), καθώς και ακύρωσης των αλλαγών και εξόδου (*Cancel*), σε αντιστοιχία με την εισαγωγή δεδομένων στην ακόρεστη ζώνη.

#### Εισαγωγή χημικών χαρακτηριστικών

Τα χημικά χαρακτηριστικά αναφέρονται στο ρύπο που εισέρχεται από την ακόρεστη στην κορεσμένη ζώνη. Αυτά, δεν εισάγονται εκ νέου στο παράθυρο διαλόγου που εμφανίζεται με την επιλογή *Chemical Characteristics* (Σχήμα 4.10), διότι έχουν εισαχθεί κατά την επίλυση του μοντέλου στην ακόρεστη ζώνη και επομένως οι τιμές διατηρούνται και για την επίλυση στην κορεσμένη. Το μόνο που αλλάζει εδώ είναι ότι κάτω αριστερά στο παράθυρο αναφέρεται και πάλι το συνολικό μήκος της κορεσμένης ζώνης που εξετάζεται.

The screenshot shows the 'Saturated\_input' dialog box with the 'Chemical Characteristics' tab selected. The table below lists the parameters and their values:

| Parameter                | Symbol and units  | Value   |
|--------------------------|-------------------|---------|
| Name of contaminant      |                   | unknown |
| Diffusion coefficient    | $D_0$ (scm/hr)    | 0.08    |
| Tortuosity factor        | $\tau$            | 0.6     |
| Lambda dispersivity      | $\lambda$ (cm)    | 1.026   |
| Bulk density             | $\rho_b$ (kg/ccm) | 1.35    |
| Distribution coefficient | $K$               | 0.01    |
| heta coefficient         | $\eta$            | 1       |

Below the table, there is a text field for 'Total Length of Soil (cm)' with the value '120' entered. At the bottom, there is a 'Project name' field with 'test03' and buttons for 'Save', 'Save & Close', and 'Cancel'.

**Σχήμα 4.10:** Χημικά χαρακτηριστικά ρύπου που εισέρχεται στην κορεσμένη ζώνη.

#### Εισαγωγή αριθμητικών παραμέτρων

Με την εντολή *Numerical Parameters* εισάγονται οι αριθμητικές παράμετροι της επίλυσης (Σχήμα 4.). Και σε αυτή την περίπτωση τα πράγματα είναι απλά, δεδομένου ότι οι τιμές που αφορούν τις χρονικές περιόδους διαβροχής και τη διάρκειά τους (σε hr) παραμένουν ίδιες με αυτές της επίλυσης στην ακόρεστη ζώνη. Στα δεξιά εισάγεται από το χρήστη μόνο το στοιχειώδες διάστημα μήκους

για το οποίο θα υπολογίζονται οι διαφορές παράμετροι της επίλυσης ( $dx$  σε cm). Με την επιλογή *Calculate* υπολογίζεται ο αριθμός των βημάτων απόστασης στα οποία διαιρείται το συνολικό μήκος της εδαφικής τομής (*Length steps*).

Σημειώνεται εδώ ότι κάθε φορά που ο χρήστης μεταβάλλει το στοιχειώδες διάστημα μήκους, πρέπει να υπολογίζονται εκ νέου τα συνολικά βήματα απόστασης προκειμένου να πραγματοποιηθεί η επίλυση.

**Vadose\_input**

Soil Characteristics    Chemical Characteristics    **Numerical Parameters**    Initial & Boundary Conditions

Table of time elements

| Periods of time | Name of periods | Duration (hr) |
|-----------------|-----------------|---------------|
| 1               | raining         | 300           |
| 2               | stop            | 500           |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |

Total time (hr)    800

dt (hr)    0.5    **Calculate**

Time steps    1600

Total Depth (cm)    10

dz (cm)    0.5    **Calculate**

Depth steps    20

Project name: test03    **Save**    **Save & Close**    **Cancel**

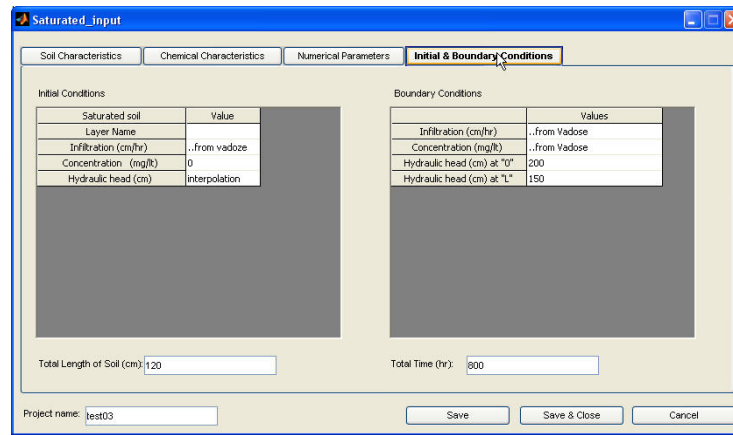
**Σχήμα 4.20:** Εισαγωγή αριθμητικών παραμέτρων επίλυσης για την κορεσμένη ζώνη.

## Εισαγωγή αρχικών και συνοριακών συνθηκών

Όπως υποδεικνύεται και από το Σχήμα 4.11 η μόνη αρχική συνθήκη που εισάγεται σε αυτό το σημείο είναι η συγκέντρωση  $C$ . Η ποσότητα νερού που διηθείται στην κορεσμένη ζώνη αποτελεί ουσιαστικά την ποσότητα νερού που παρέχει ο τελευταίος κόμβος της ακόρεστης ζώνης. Το αρχικό υδραυλικό ύψος σε όλους τους κόμβους εκτός των συνοριακών (δεδομένα συνοριακών συνθηκών) υπολογίζονται με βάση την εξίσωση Dupuit. Τα δεδομένα των συνοριακών – τα υδραυλικά ύψη - δύνονται στο πεδίο "Boundary Condition".

Στο κάτω μέρος των δύο πινάκων εμφανίζεται το συνολικό μήκος της εδαφικής τομής καθώς και η συνολική χρονική διάρκεια για την οποία εξετάζεται το πρόβλημα.



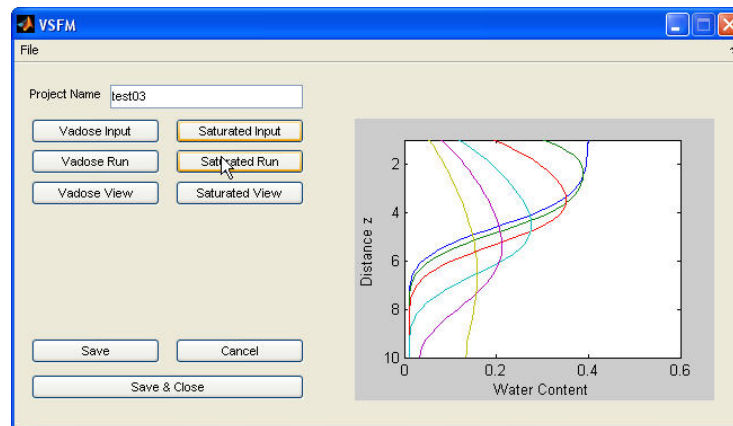


**Σχήμα 4.11:** Εισαγωγή αρχικών και συννοριακών συνθηκών για την ακόρεστη ζώνη.

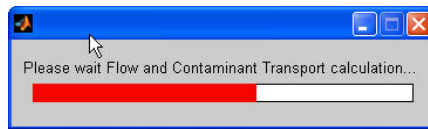
Με την ολοκλήρωση της διαδικασίας εισαγωγής δεδομένων επιλέγεται η εντολή *Save & Close* με την οποία αποθηκεύονται όλα τα δεδομένα σε αρχείο και γίνεται έξοδος του χρήστη από το συγκεκριμένο υποπρόγραμμα.

#### 4.2.2.2 Επίλυση μοντέλου ροής

Ακολουθεί η επίλυση του μοντέλου με την επιλογή *Saturated Run* από το αρχικό παράθυρο διαλόγου του προγράμματος όπως φαίνεται από το Σχήμα 4.12. Κατά τη διάρκεια της επίλυσης εμφανίζεται ένα παράθυρο μηνύματος αντίστοιχο με αυτό στην περίπτωση της ακόρεστης ζώνης (Σχήμα 4.13) το οποίο ενημερώνει το χρήστη για την χρονική πορεία της διαδικασίας.



**Σχήμα 4.12:** Επίλυση του μοντέλου ροής στην κορεσμένη ζώνη.

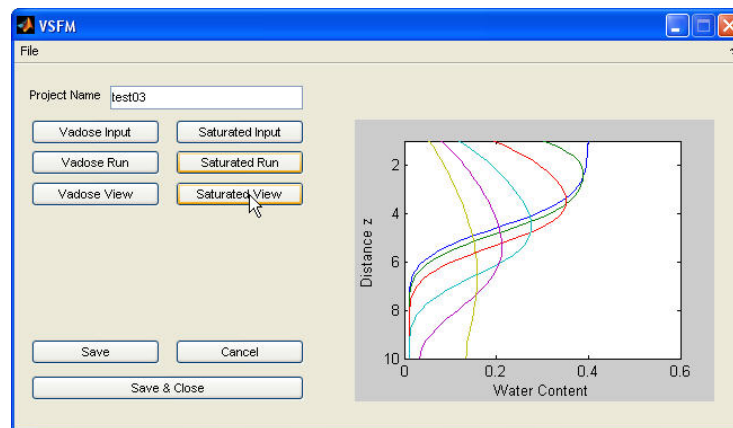


**Σχήμα 4.13:** Παράθυρο μηνύματος που εμφανίζεται κατά την επίλυση του μοντέλου.

#### 4.2.2.3 Εμφάνιση αποτελεσμάτων

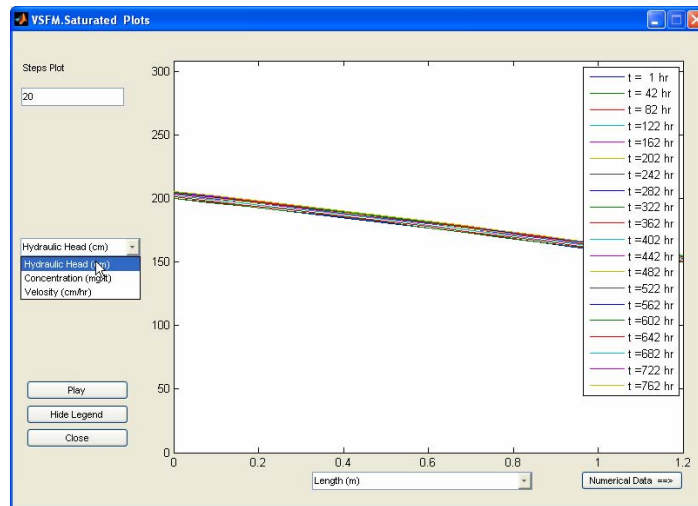
Από το αρχικό παράθυρο διαλόγου επιλέγεται η εντολή *Saturated View* (Σχήμα 4.14) προκειμένου να εμφανιστούν τα αποτελέσματα της επίλυσης.

Στο παράθυρο αποτελεσμάτων (Σχήμα 4.15), ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να επιλέξει ποιες παράμετροι επιθυμεί να παρασταθούν γραφικά κατά μήκος του εδαφικού προφίλ. Όπως και στην περίπτωση της ακόρεστης ζώνης, αρχικά επιλέγει τον αριθμό των καμπυλών (χρονικών βημάτων), με εισαγωγή της κατάλληλης τιμής στο πεδίο *Steps Plot*. Και πάλι σε περίπτωση που εισαχθεί τιμή μεγαλύτερη του 20, αντί υπομνήματος εμφανίζεται το μήνυμα "Lines > 20!".



**Σχήμα 4.14:** Επιλογή εμφάνισης αποτελεσμάτων επίλυσης.

Στο κάτω αριστερό μέρος του παραθύρου των αποτελεσμάτων της επίλυσης στην κορεσμένη ζώνη υπάρχουν οι επιλογές για την απόκρυψη ή εμφάνιση του υπομνήματος (*Hide Legend – Show Legend*) και για το κλείσιμο του παραθύρου των αποτελεσμάτων (*Close*). Η επιλογή "Numerical Data" παρουσιάζει τα αριθμητικά αποτελέσματα σε κάθε κόμβο και για κάθε χρονικό βήμα σε μορφή πίνακα.

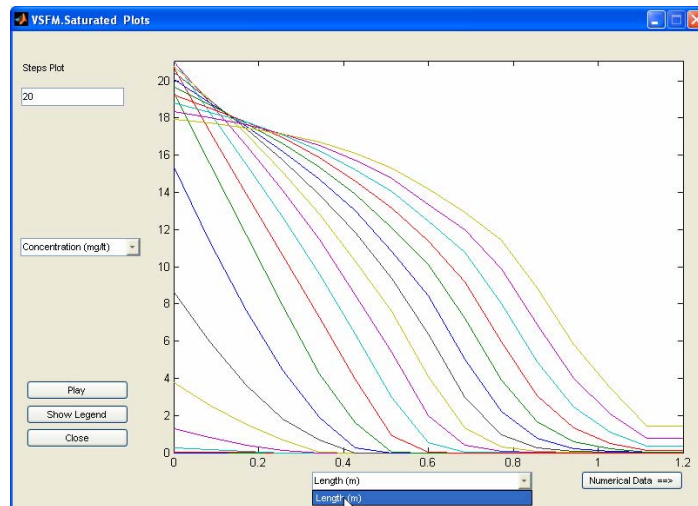


**Σχήμα 4.15:** Παράθυρο αποτελεσμάτων επίλυσης και επιλογές παραμέτρων που εμφανίζονται στο διάγραμμα.

Στον κατακόρυφο άξονα (Σχήμα 4.15), ο χρήστης μπορεί να επιλέξει μεταξύ τριών παραμέτρων:

1. Υδραυλικό ύψος σε cm (*Hydraulic Head*).
2. Συγκέντρωση σε mg/l (*Concentration*).
3. Ταχύτητα ροής σε cm/hr (*Velocity*).

Στον οριζόντιο άξονα του διαγράμματος εμφανίζεται μόνο το μήκος του εδαφικού προφίλ (Σχήμα 4.16), ώστε να δίνεται η κατανομή των ποσοτήτων που ενδιαφέρουν κατά μήκος αυτού.



**Σχήμα 4.16:** Παράθυρο αποτελεσμάτων επίλυσης.

Στο κεφάλαιο 5 δίνονται κάποια παραδείγματα επιλύσεων με το πρόγραμμα *VSFM* με σκοπό την εξοικείωση του χρήστη και την παρουσίαση της διαδικασίας επίλυσης ενός προβλήματος ροής στην ακόρεστη και κορεσμένη ζώνη.

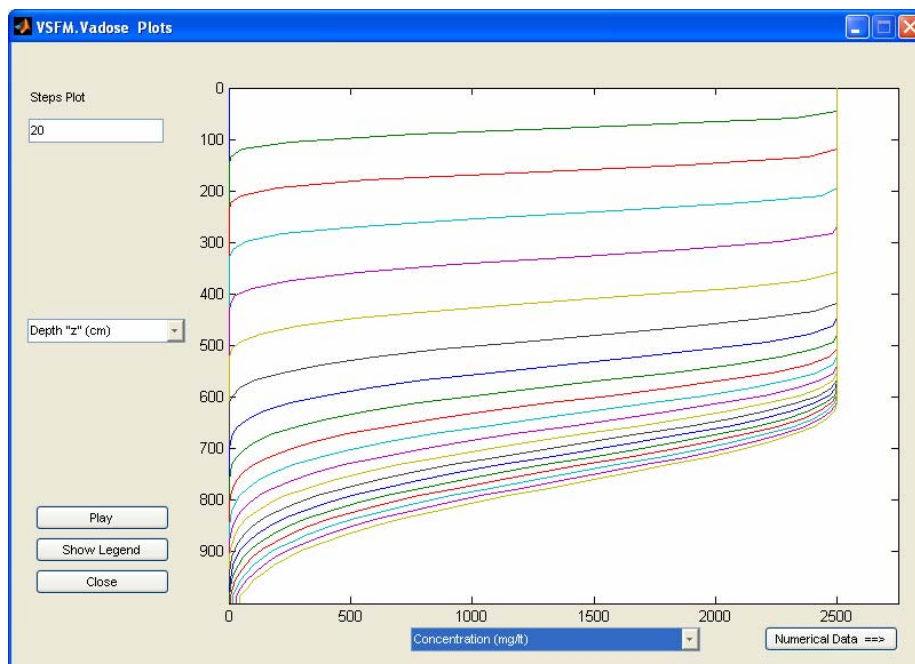
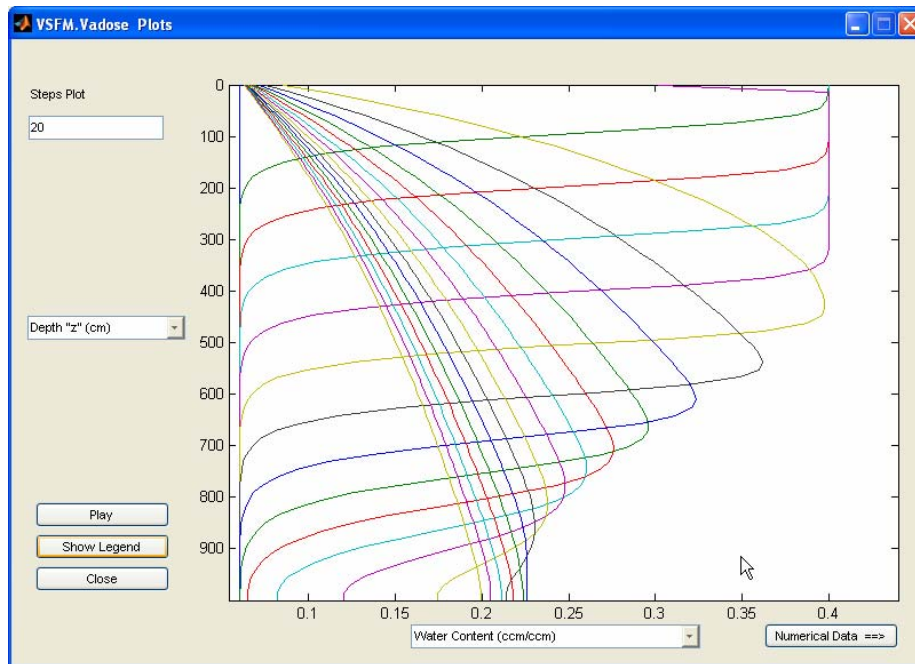
## 5. ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ ΕΠΙΛΥΣΕΩΝ

Στα παραδείγματα που ακολουθούν τα δεδομένα εισόδου παρουσιάζονται είτε πινακοποιημένα είτε με την εμφάνιση του “παραθύρου” διαλόγου εισαγωγής δεδομένων του προγράμματος.

### **test01**

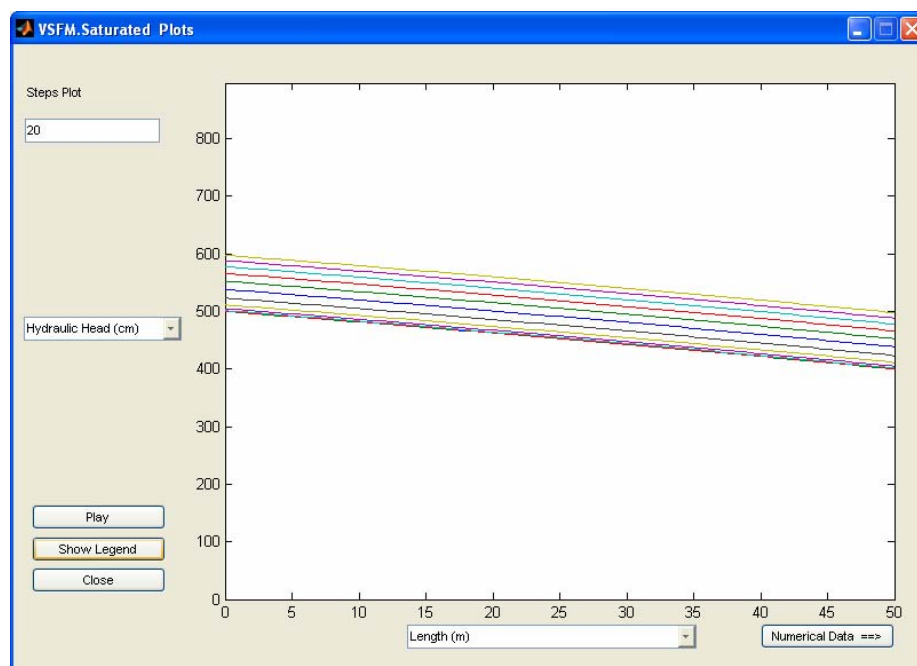
Στο παράδειγμα αυτό χρησιμοποιείται ένα εδαφικό στρώμα με μεγάλο σχετικά βάθος ακόρεστης και μήκος κορεσμένης ζώνης.

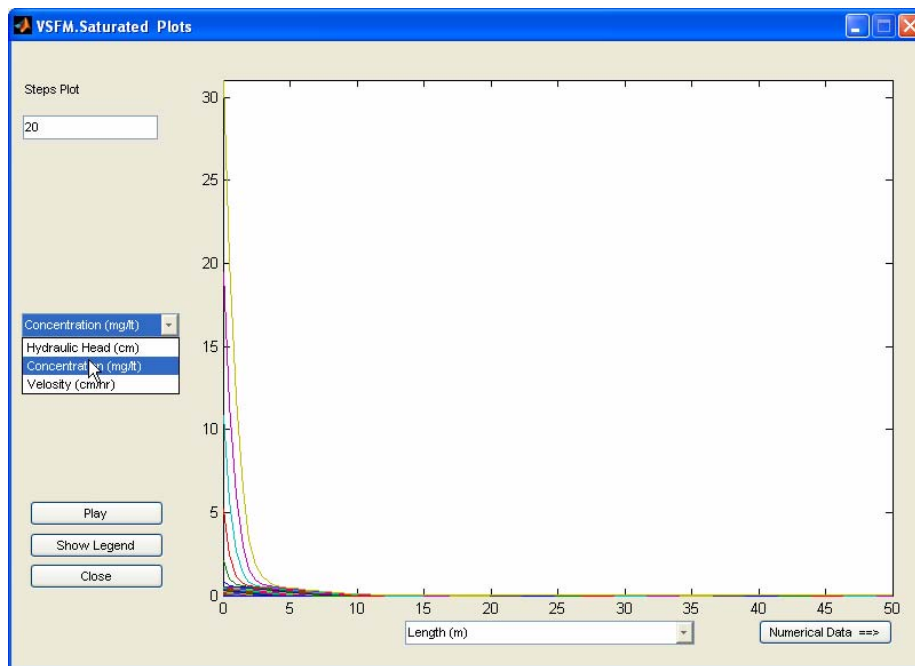
| <b>ΑΚΟΡΕΣΤΗ ΖΩΝΗ</b>   |       |  |      |
|--|-------|--|------|
| <b>Εδαφικά χαρακτηριστικά</b>  |       | <b>Χημικά χαρακτηριστικά</b>   |      |
| Αριθμός εδαφικών σχηματισμών   | 1     | Όνομα του ρύπου  | -    |
| Όνομα εδαφικών σχηματισμών   | -     | Συντελεστής διάχυσης $D_0$ (cm <sup>2</sup> /h)                              | 0.08 |
| Πάχος $z$ (cm)   | 1000  | Παράγοντας στρεβλότητας $\tau$   | 1.07 |
| Υδραυλική αγωγιμότητα $K_s$ (cm/h)   | 0.5   | Συντελεστής διασποράς (cm) $\lambda$   | 1.2  |
| Ελάχιστη τιμή περιεκτικότητας ύδατος $\theta_{r,s}$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )                      | 0.057 | Ογκομετρική πυκνότητα $d_b$ (kg/cm <sup>3</sup> )                            | 1.25 |
| Ογκομετρική περιεκτικότητα ύδατος στην κατάσταση κορεσμού $\theta_{r,s}$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ) | 0.41  | Συντελεστής κατανομής $k$  | 0.01 |
| Τριχοειδές ύψος απορρόφησης όπου $\theta=\theta_{r,s}$ , $\psi_{b,s}$ (cm)                                   | 14    | Συντελεστής $\eta$   | 2    |
| Πειραματική παράμετρος $\lambda_{m,d}$   | 0.55  |  |      |
| $n$  | 2.8   |  |      |
| <b>Αριθμητικές παράμετροι</b>  |       | <b>Αρχικές συνθήκες</b>  |      |
| Αριθμός χρονικών περιόδων  | 2     | Αριθμός εδαφικών σχηματισμών   | 1    |
| Όνομα περιόδων   | -     | Όνομα εδαφικών σχηματισμών   | -    |
| Διάρκεια περιόδων (hr)   | 300   | Περιεκτικότητα σε νερό $W_c$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )             | 0.06 |
|  | 1200  |  |      |
| Συνολική διάρκεια (hr)   | 1500  | Συγκέντρωση $C$ (mg/l)   | 0    |
| Στοιχειώδες διάστημα χρόνου (hr)   | 1     | <b>Συνοριακές συνθήκες</b>   |      |
| Χρονικά βήματα   | 1500  | Αριθμός περιόδων   | 2    |
| Συνολικό βάθος (cm)  | 1000  | Όνομα περιόδων   | -    |
| Στοιχειώδες διάστημα απόστασης (cm)  | 15    | Επιφανειακή περιεκτικότητα σε νερό $W_c$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ) | 0.4  |
|  |       |  | 0.06 |
| Βήματα απόστασης   | 67    | Επιφανειακή συγκέντρωση $C$ (mg/l)   | 2500 |
|  |       |  | 0    |



| ΚΟΡΕΣΜΕΝΗ ΖΩΝΗ                      |      |                                    |        |
|-------------------------------------|------|------------------------------------|--------|
| Εδαφικά χαρακτηριστικά              |      | Χημικά χαρακτηριστικά              |        |
| Αριθμός εδαφικών σχηματισμών        | 1    | *                                  |        |
| Όνομα εδαφικών σχηματισμών          | -    |                                    |        |
| Υδραυλική αγωγιμότητα $K$ (cm/h)    | 12.3 |                                    |        |
| Ενεργό πορώδες $n_{ef}$             | 0.32 |                                    |        |
| Μήκος εδαφικού προφίλ (cm)          | 5000 |                                    |        |
| Αριθμητικές παράμετροι              |      | Αρχικές συνθήκες                   |        |
| Αριθμός περιόδων                    | *    | Όνομα εδαφικών σχηματισμών         | -      |
| Όνομα περιόδων                      | *    | Διήθηση (cm/hr)                    | *      |
| Διάρκεια περιόδων (hr)              | *    | Συγκέντρωση $C$ (mg/l)             | 0      |
| Συνολική διάρκεια (hr)              | *    | Υδραυλικό ύψος (cm)                | Dupuit |
| Στοιχειώδες διάστημα χρόνου (hr)    | *    | Συνοριακές συνθήκες                |        |
| Χρονικά βήματα                      | *    | Διήθηση (cm/hr)                    | *      |
|                                     |      | Συγκέντρωση $C$ (mg/l)             | *      |
| Στοιχειώδες διάστημα απόστασης (cm) | 50   | Υδραυλικό ύψος στο σημείο «0» (cm) | 500    |
| Βήματα απόστασης                    | 100  | Υδραυλικό ύψος στο σημείο «L» (cm) | 400    |

\* Από την ακόρεστη ζώνη



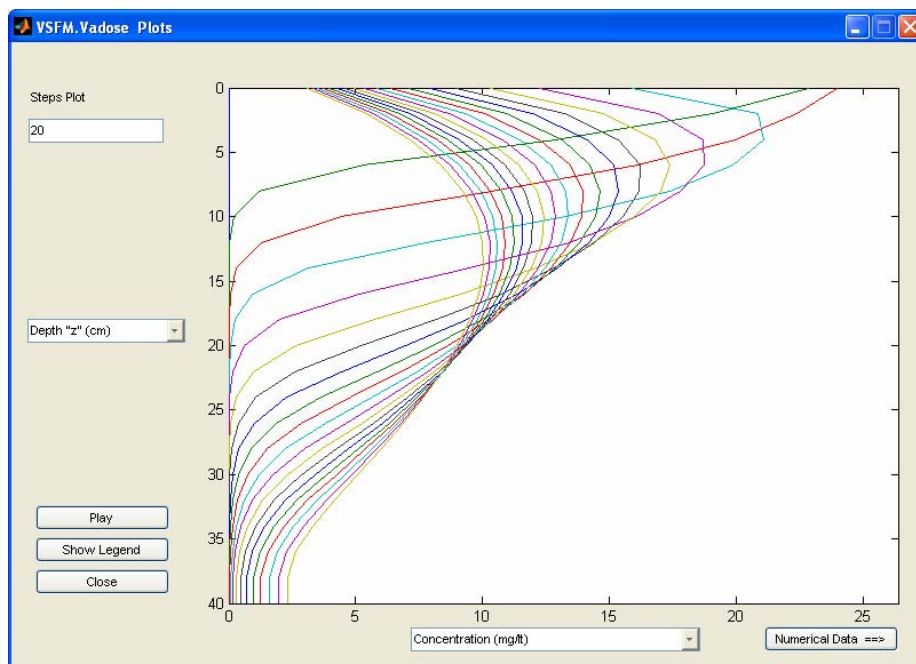
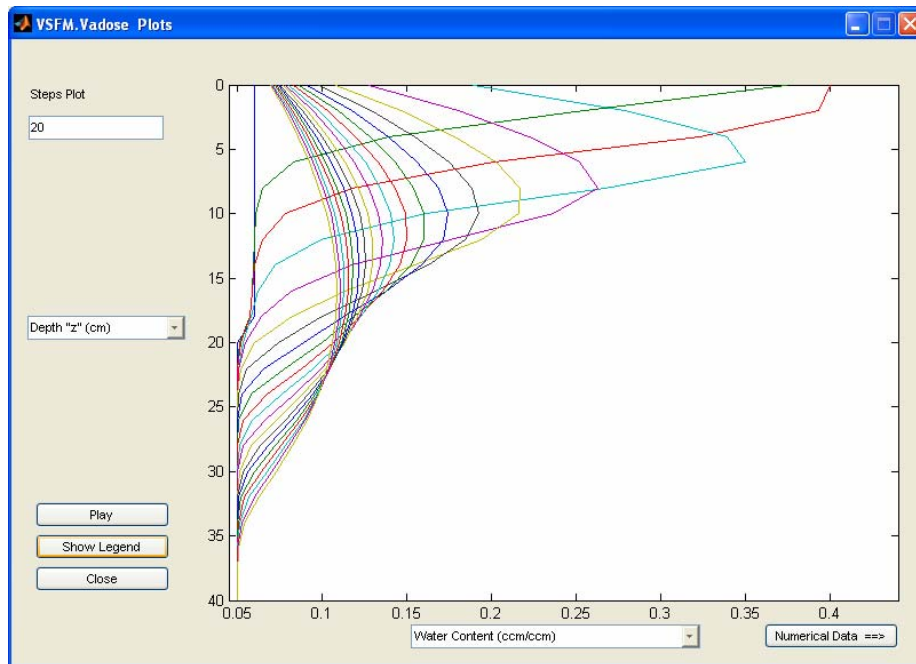




**test02**

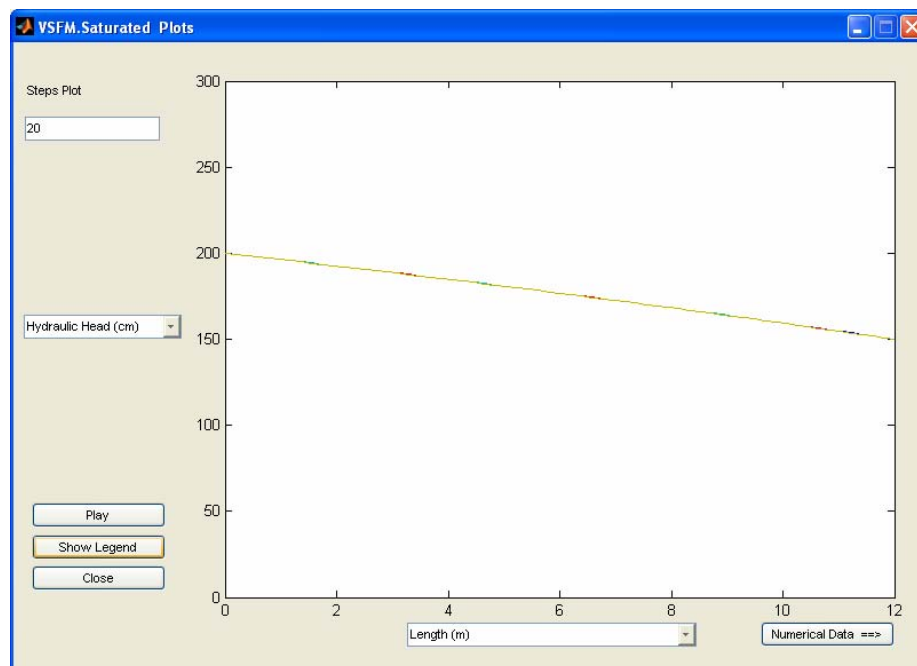
Στο παράδειγμα αυτό χρησιμοποιούνται δύο εδαφικά στρώματα με μικρά σχετικά βάθη ακόρεστης ζώνης. Το μήκος της κορεσμένης ζώνης είναι σχετικά μεγαλύτερο.

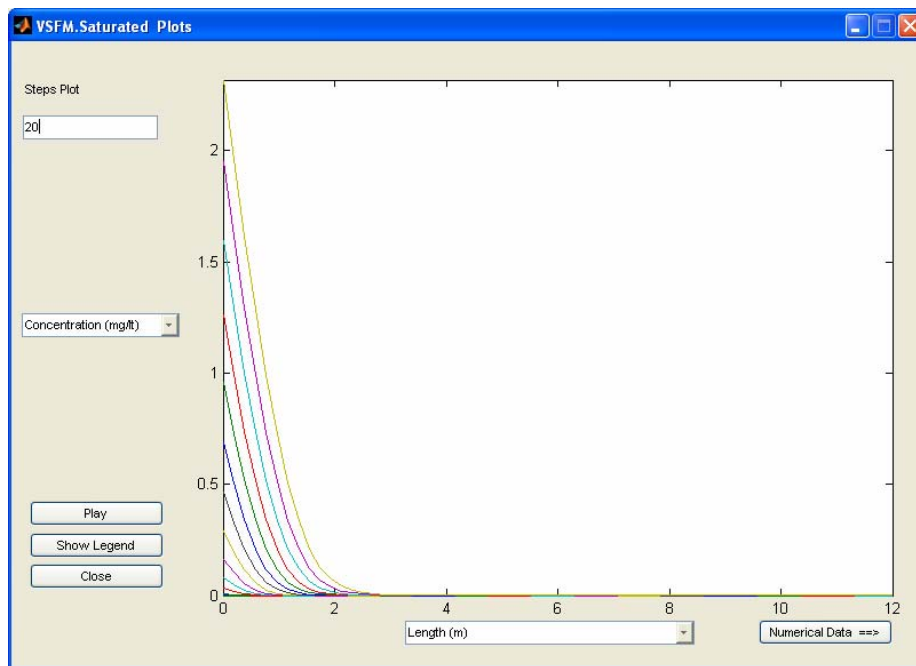
| <b>ΑΚΟΡΕΣΤΗ ΖΩΝΗ</b>  |                |  |              |
|---|----------------|--|--------------|
| <b>Εδαφικά χαρακτηριστικά</b>   |                | <b>Χημικά χαρακτηριστικά</b>   |              |
| Αριθμός εδαφικών σχηματισμών  | 2              | Όνομα του ρύπου  | -            |
| Όνομα εδαφικών σχηματισμών  | -              | Συντελεστής διάχυσης $D_0$ (cm <sup>2</sup> /h)                              | 0.08         |
| Πάχος $z$ (cm)  | 20<br>20       | Παράγοντας στρεβλότητας $\tau$   | 1.07         |
| Υδραυλική αγωγιμότητα $Ks$ (cm/h)   | 0.01<br>0.06   | Συντελεστής διασποράς (cm) $\lambda$   | 1.026        |
| Ελάχιστη τιμή περιεκτικότητας ύδατος $\Theta_{r\_min}$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )                      | 0.057<br>0.046 | Ογκομετρική πυκνότητα $d_b$ (kg/cm <sup>3</sup> )                            | 1.35         |
| Ογκομετρική περιεκτικότητα ύδατος στην κατάσταση κορεσμού $\Theta_{r\_sat}$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ) | 0.41<br>0.54   | Συντελεστής κατανομής $k$  | 0.01         |
| Τριχοειδές ύψος απορρόφησης όπου $\theta = \theta_r$ , $\Psi_{r\_b}$ (cm)                                       | 1.5<br>1.7     | Συντελεστής $\eta$   | 1            |
| Πειραματική παράμετρος $\lambda$  | 0.6<br>0.8     |  |              |
| $n$   | 2.8<br>3.1     |  |              |
| <b>Αριθμητικές παράμετροι</b>   |                | <b>Αρχικές συνθήκες</b>  |              |
| Αριθμός χρονικών περιόδων   | 2              | Αριθμός εδαφικών σχηματισμών   | 2            |
| Όνομα περιόδων  | -              | Όνομα εδαφικών σχηματισμών   | -            |
| Διάρκεια περιόδων (hr)  | 300<br>200     | Περιεκτικότητα σε νερό $W_c$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> )             | 0.06<br>0.05 |
| Συνολική διάρκεια (hr)  | 2300           | Συγκέντρωση $C$ (mg/l)   | 0<br>0       |
| Στοιχειώδες διάστημα χρόνου (hr)  | 5              | <b>Συνοριακές συνθήκες</b>   |              |
| Χρονικά βήματα  | 460            | Αριθμός περιόδων   | 2            |
| Συνολικό βάθος (cm)   | 40             | Όνομα περιόδων   | -            |
| Στοιχειώδες διάστημα απόστασης (cm)   | 2              | Επιφανειακή περιεκτικότητα σε νερό $W_c$ (cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ) | 0.4<br>0.06  |
| Βήματα απόστασης  | 20             | Επιφανειακή συγκέντρωση $C$ (mg/l)   | 2500<br>0    |



| ΚΟΡΕΣΜΕΝΗ ΖΩΝΗ                      |      |                                    |        |
|-------------------------------------|------|------------------------------------|--------|
| Εδαφικά χαρακτηριστικά              |      | Χημικά χαρακτηριστικά              |        |
| Αριθμός εδαφικών σχηματισμών        | 1    | *                                  |        |
| Όνομα εδαφικών σχηματισμών          | -    |                                    |        |
| Υδραυλική αγωγιμότητα $K$ (cm/h)    | 1.2  |                                    |        |
| Ενεργό πορώδες $n_{ef}$             | 0.27 |                                    |        |
| Μήκος εδαφικού προφίλ (cm)          | 1200 |                                    |        |
| Αριθμητικές παράμετροι              |      | Αρχικές συνθήκες                   |        |
| Αριθμός περιόδων                    | *    | Όνομα εδαφικών σχηματισμών         | -      |
| Όνομα περιόδων                      | *    | Διήθηση (cm/hr)                    | *      |
| Διάρκεια περιόδων (hr)              | *    | Συγκέντρωση $C$ (mg/l)             | 0      |
| Συνολική διάρκεια (hr)              | *    | Υδραυλικό ύψος (cm)                | Dupuit |
| Στοιχειώδες διάστημα χρόνου (hr)    | *    | Συνοριακές συνθήκες                |        |
| Χρονικά βήματα                      | *    | Διήθηση (cm/hr)                    | *      |
|                                     |      | Συγκέντρωση $C$ (mg/l)             | *      |
| Στοιχειώδες διάστημα απόστασης (cm) | 20   | Υδραυλικό ύψος στο σημείο «0» (cm) | 200    |
| Βήματα απόστασης                    | 60   | Υδραυλικό ύψος στο σημείο «L» (cm) | 150    |

\* Από την ακόρεστη ζώνη





**test04**

Στο παράδειγμα αυτό, στην ακόρεστη ζώνη χρησιμοποιούνται τέσσερα εδαφικά στρώματα με μεσαίου, σχετικά, βάθη, ενώ το μήκος της κορεσμένης ζώνης είναι σχετικά μεγαλύτερο.

[illegible]

**VSFM.Vadose Input**

Soil Characteristics   **Chemical Characteristics**   Numerical Parameters   Initial & Boundary Conditions

Table of Chemical Characteristics

| Parameter                | Symbol and units | Value   |
|--------------------------|------------------|---------|
| Name of contaminant      |                  | unknown |
| Diffusion coefficient    | $D_0$ (scm/hr)   | 0.08    |
| <b>Tortuosity factor</b> | $\tau$           | 1.21    |
| Lamda dispersivity       | $\lambda$ (cm)   | 1.026   |
| Bulk density             | $\rho_b$ (g/ccm) | 1.35    |
| Distribution coefficient | $K$              | 0.01    |
| heta coefficient         | $\eta$           | 1       |

Total Depth of Soil (cm):

Project name:

Save   Save & Close   Cancel

**VSFM.Vadose Input**

Soil Characteristics    Chemical Characteristics    Numerical Parameters    **Initial & Boundary Conditions**

**Initial Conditions**

| Layer No | Layer Name | Water Content<br>WC (ccm/ccm) | Concentration<br>C (mg/lit) |
|----------|------------|-------------------------------|-----------------------------|
| 1        | loamy sand | 0.06                          | 0                           |
| 2        | sand       | 0.05                          | 0                           |
| 3        | hard       | 0.05                          | 0                           |
| 4        | sand       | 0.05                          | 0                           |

Total Depth of Soil (cm):

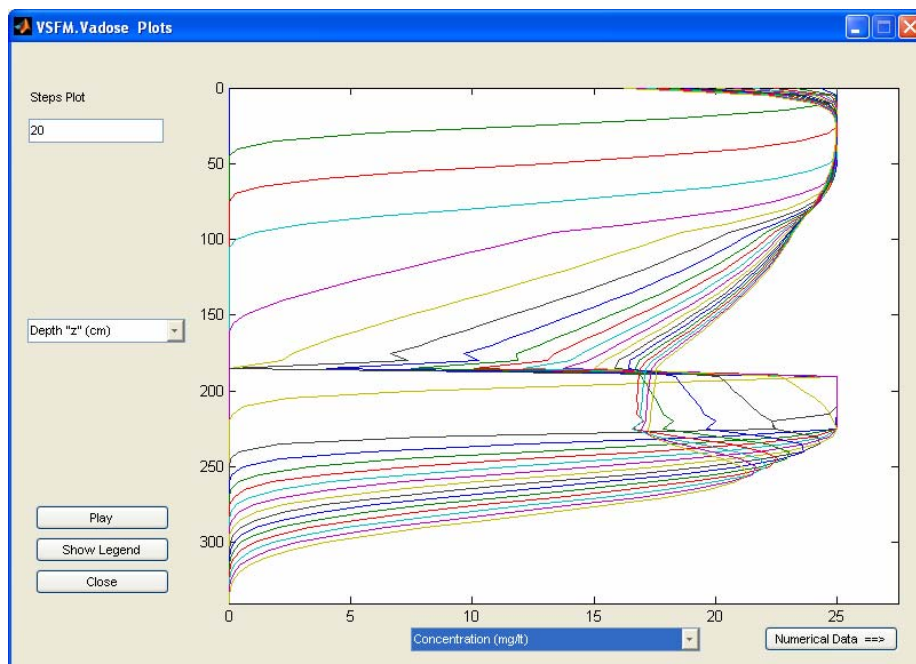
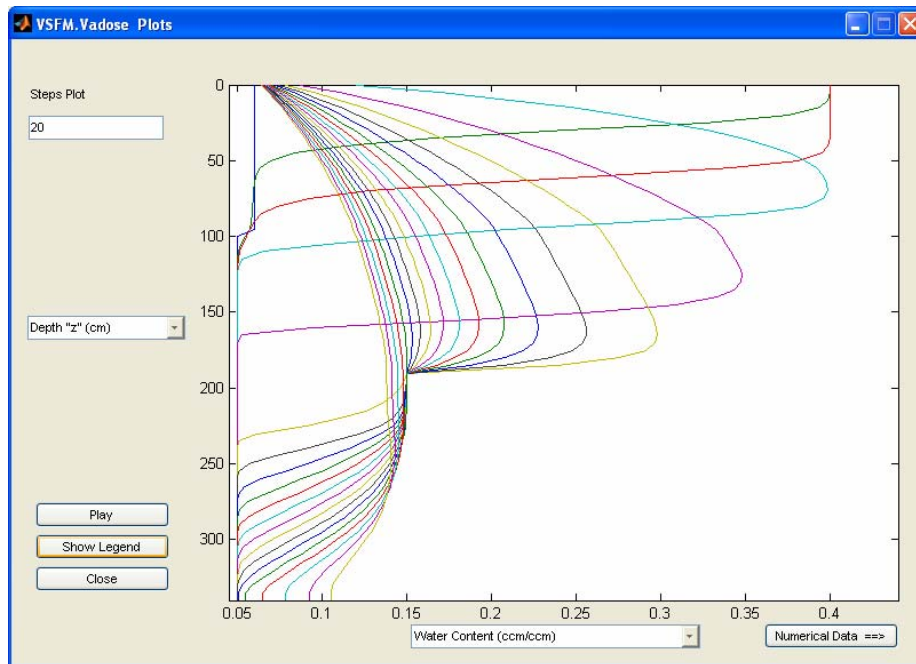
**Boundary Conditions**

| Period No | Period Name | Surface WC<br>WC (ccm/ccm) | Surface C<br>C (mg/lit) |
|-----------|-------------|----------------------------|-------------------------|
| 1         | raining     | 0.4                        | 25                      |
| 2         | stop        | 0.06                       | 0                       |

Total Time (hr):

Project name:

Save    Save & Close    Cancel



**VSM.Saturated Input**

Soil Characteristics   Chemical Characteristics   Numerical Parameters   Initial & Boundary Conditions

Table of Saturated Soil Layer with their Characteristics

| No of Layer | Name       | Depth (cm) | Ks (cm/hr) | Theta_r (ccm/ccm) | Theta_s (ccm/ccm) | Psi_b (cm) | Lamda | n    |
|-------------|------------|------------|------------|-------------------|-------------------|------------|-------|------|
| 1           | loamy sand | 100        | 0.1        | 0.057             | 0.41              | 5          | 0.6   | 2.8  |
| 2           | sand       | 90         | 0.6        | 0.046             | 0.54              | 7          | 0.8   | 3.1  |
| 3           | hard       | 40         | 0.05       | 0.031             | 0.15              | 17         | 0.72  | 3.02 |
| 4           | sand       | 110        | 0.6        | 0.046             | 0.54              | 7          | 0.8   | 3.1  |

Saturated soil layer Values

|             |        |
|-------------|--------|
| name        | myname |
| K (cm/hr)   | 11     |
| n_ef        | 0.32   |
| Length (cm) | 1200   |

Total Length of Soil (cm): 1200

Project name: test04   Save   Save & Close   Cancel

**VSM.Saturated Input**

Soil Characteristics   Chemical Characteristics   Numerical Parameters   Initial & Boundary Conditions

Table of time elements

| Periods of time | Name of periods | Duration (hr) |
|-----------------|-----------------|---------------|
| 1               | raining         | 300           |
| 2               | stop            | 2000          |

Total time (hr) 2300

dt (hr) 1

Time steps 2300

Total Length (cm) 1200

dx (cm) 20   Calculate

Length steps 60

Project name: test04   Save   Save & Close   Cancel



**VSFM.Saturated Input**

Soil Characteristics   Chemical Characteristics   Numerical Parameters   **Initial & Boundary Conditions**

Initial Conditions

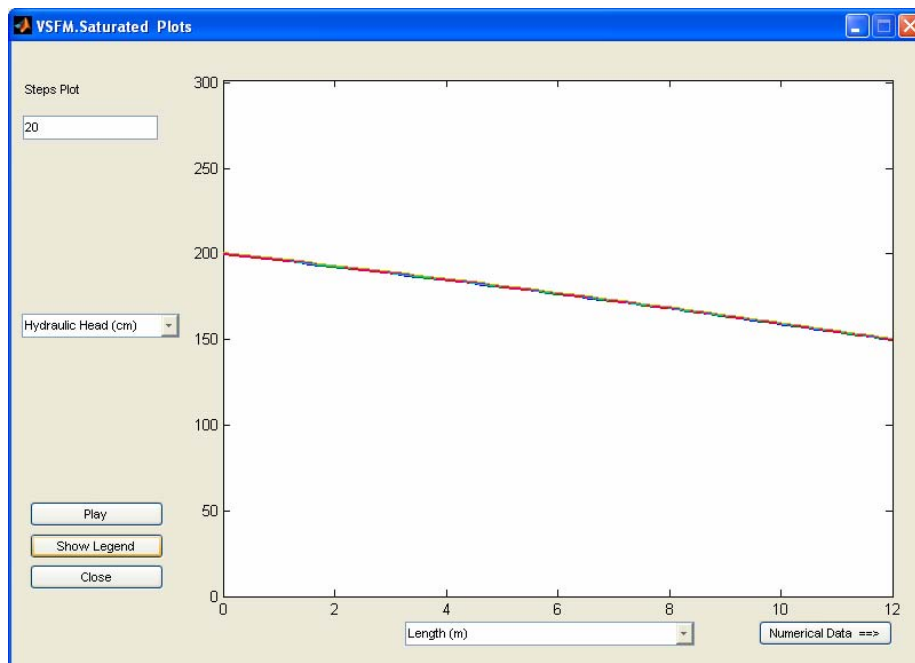
| Saturated soil         | Value         |
|------------------------|---------------|
| Layer Name             | myname        |
| Infiltration (cm/hr)   | ..from vadoze |
| Concentration (mg/lit) | 0             |
| Hydraulic head (cm)    | Dupuit Eq.    |

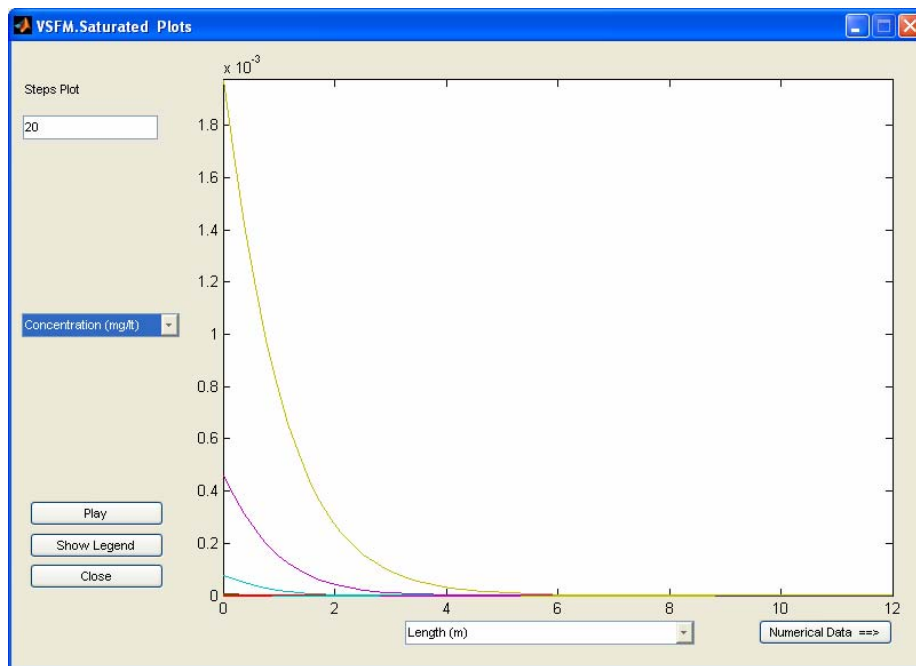
Boundary Conditions

|                            | Values        |
|----------------------------|---------------|
| Infiltration (cm/hr)       | ..from Vadoze |
| Concentration (mg/lit)     | ..from Vadoze |
| Hydraulic head (cm) at "0" | 200           |
| Hydraulic head (cm) at "L" | 150           |

Total Length of Soil (cm): 1200   Total Time (hr): 2300

Project name: test04   Save   Save & Close   Cancel





[illegible]

**VSFM. Vadose Input**

Soil Characteristics    Chemical Characteristics    **Numerical Parameters**    Initial & Boundary Conditions

Table of time elements

| Periods of time | Name of periods | Duration (hr) |
|-----------------|-----------------|---------------|
| 1               | dry             | 175200        |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |
|                 |                 |               |

Total time (hr)

dt (hr)

Time steps

Total Depth (cm)

dz (cm)

Depth steps

Project name:

**VSFM.Vadose Input**

Soil Characteristics   Chemical Characteristics   Numerical Parameters   **Initial & Boundary Conditions**

**Initial Conditions**

| Layer No | Layer Name | Water Content | Concentration |
|----------|------------|---------------|---------------|
|          |            | WC (ccm/ccm)  | C (mg/l)      |
| 1        | soil       | 0.02          | 1000          |

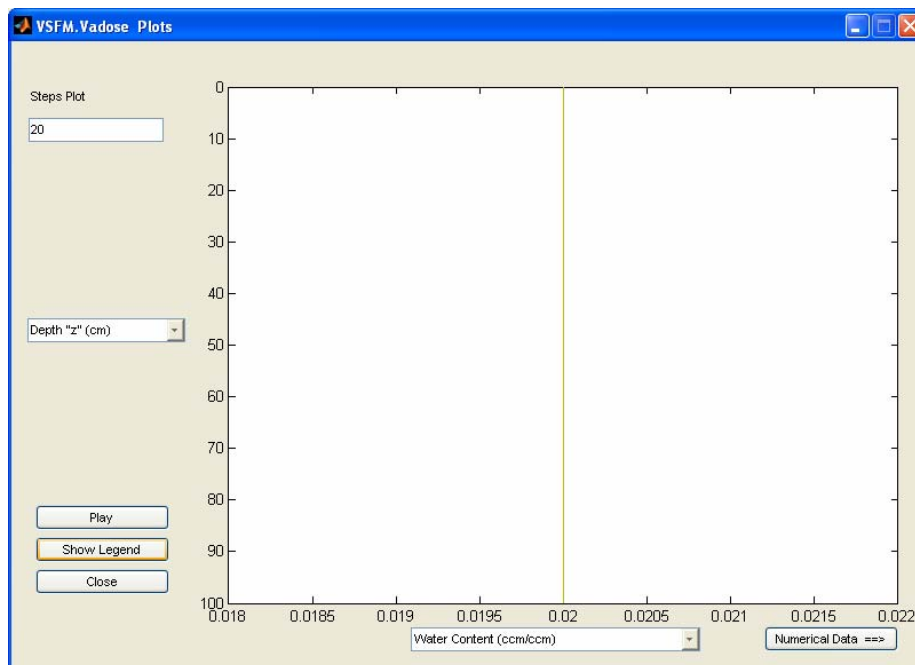
Total Depth of Soil (cm):

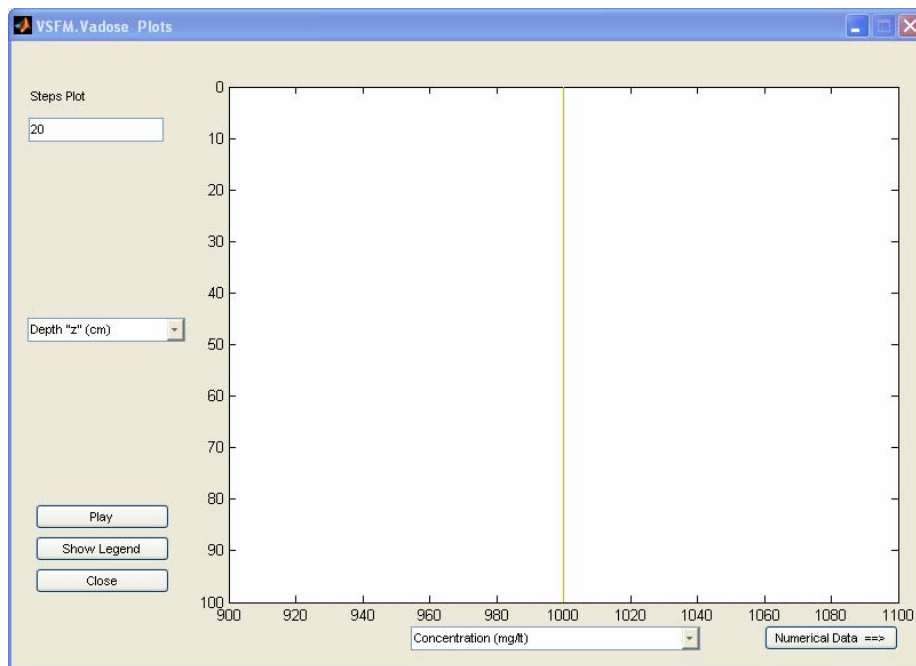
**Boundary Conditions**

| Period No | Period Name | Surface WC   | Surface C |
|-----------|-------------|--------------|-----------|
|           |             | WC (ccm/ccm) | C (mg/l)  |
| 1         | dry         | 0.02         | 1000      |

Total Time (hr):

Project name:





The VSFM Saturated Input window has tabs for 'Soil Characteristics', 'Chemical Characteristics', 'Numerical Parameters', and 'Initial & Boundary Conditions'. The 'Soil Characteristics' tab is active, showing a table of saturated soil layer characteristics.

| No of Layer                 | Name        | Depth (cm) | Ks (cm/hr) | Theta_r (ccm/ccm) | Theta_s (ccm/ccm) | Psi_b (cm) | Lamda | n    |
|-----------------------------|-------------|------------|------------|-------------------|-------------------|------------|-------|------|
| 1                           | soil        | 100        | 2.5        | 0.02              | 0.45              | 3.5        | 3.4   | 2.56 |
| Saturated soil layer Values |             |            |            |                   |                   |            |       |      |
|                             | name        | soil2      |            |                   |                   |            |       |      |
|                             | K (cm/hr)   | 3.6        |            |                   |                   |            |       |      |
|                             | n_ef        | 0.4        |            |                   |                   |            |       |      |
|                             | Length (cm) | 30480      |            |                   |                   |            |       |      |

Total Length of Soil (cm): 30480

Project name: Test\_23\_08\_2006

Buttons: Save, Save & Close, Cancel

**VSFM.Saturated Input**

Soil Characteristics   Chemical Characteristics   **Numerical Parameters**   Initial & Boundary Conditions

Table of time elements

| Periods of time | Name of periods | Duration (hr) |
|-----------------|-----------------|---------------|
| 1               | dry             | 175200        |

Total time (hr)

dt (hr)

Time steps

Total Length (cm)

dx (cm)

Length steps

Project name:

**VSFM.Saturated Input**

Soil Characteristics   Chemical Characteristics   Numerical Parameters   **Initial & Boundary Conditions**

Initial Conditions

|                        | Value         |
|------------------------|---------------|
| Saturated soil         |               |
| Layer Name             | soil2         |
| Infiltration (cm/hr)   | ..from vadoze |
| Concentration (mg/lit) | 0             |
| Hydraulic head (cm)    | Dupuit Eq.    |

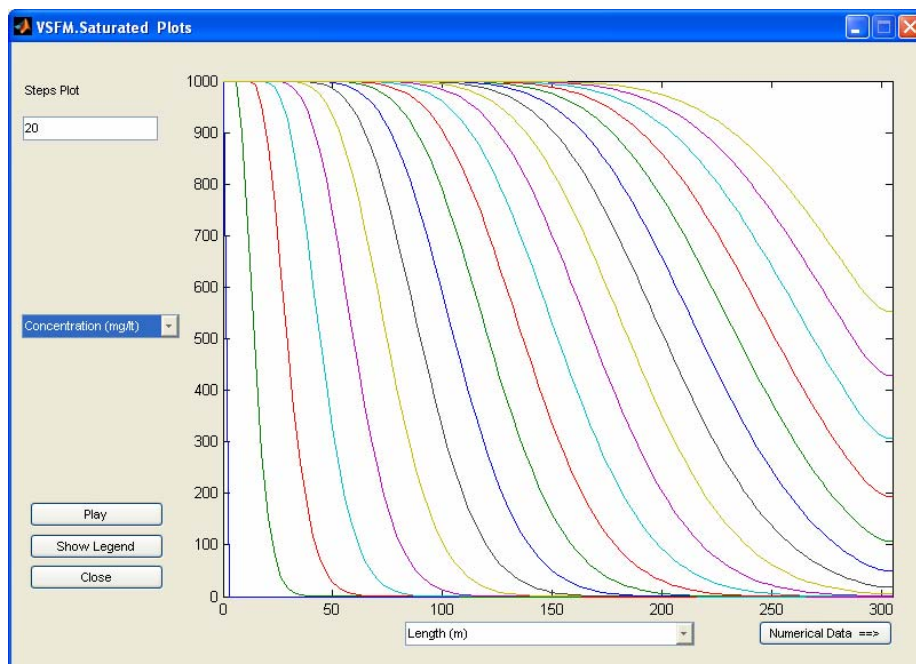
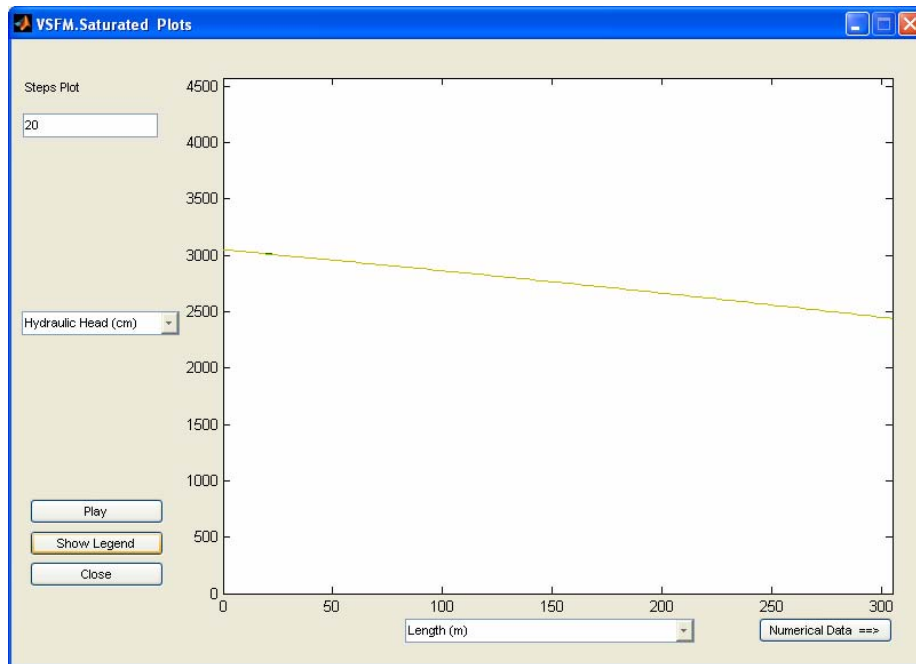
Boundary Conditions

|                            | Values        |
|----------------------------|---------------|
| Infiltration (cm/hr)       | ..from Vadoze |
| Concentration (mg/lit)     | ..from Vadoze |
| Hydraulic head (cm) at "0" | 3048          |
| Hydraulic head (cm) at "L" | 2438.4        |

Total Length of Soil (cm):

Total Time (hr):

Project name:



Από το παραπάνω σχήμα φαίνεται ότι η τιμή της συγκέντρωση μετά τα 1000 ft



είναι πολύ κοντά στην αναλυτική λύση. Μετά την εμφάνιση των δεδομένων στο παράθυρο του πίνακα αποτελεσμάτων με την εντολή "Numerical Data" διαπιστώνεται ότι η τιμή στην απόσταση αυτή είναι 667mg/lt. Η σχετική διαφορά των τιμών είναι:

$$\frac{|651 - 667|}{651} = 0.0246 = 2.46\%$$

## 6. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ – ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ

Η εξίσωση του Richards για ροή ύδατος σε εδάφη με διαφορετικούς βαθμούς κορεσμού (ακόρεστη ζώνη) έχει μια καθαρά φυσική βάση. Γι' αυτό το λόγο είναι γενικά **εφαρμόσιμη** και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για έρευνα και ανάλυση διαφόρων σεναρίων.

Η δυσκολία στην επίλυσή της οφείλεται στην **παραβολική** της μορφή σε συνδυασμό με την ισχυρή μη γραμμικότητα των συναρτήσεων που περιγράφουν την υδραυλική συμπεριφορά του εδάφους και συσχετίζουν την περιεκτικότητα σε νερό, το υδραυλικό ύψος του εδαφικού ύδατος και την υδραυλική αγωγιμότητα.

Επίσης, οι **απότομες μεταβολές** των συνθηκών υγρασίας κοντά στην επιφάνεια του εδάφους που προκαλούν μέτωπα διαβροχής με μεγάλες κλίσεις σε ξηρά εδάφη ή το αντίστροφο, μπορεί να αποτελέσουν πρόβλημα για την επίλυση της εξίσωσης.

Τα παραπάνω έχουν ως αποτέλεσμα η επίλυση της εξίσωσης ροής να εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από τη δομή του αριθμητικού μοντέλου και από τα **χρονικά** και **χωρικά βήματα** που εφαρμόζονται. Έτσι ακόμη και αν το κριτήριο του Courant number ικανοποιείται, για την αποφυγή των αριθμητικών σφαλμάτων θα πρέπει ανάλογα με την περίπτωση μελέτης να ρυθμίζουμε τα αντίστοιχα  $dt$  και  $dx$ .

Η εξίσωση ροής για την κορεσμένη ζώνη είναι απλούστερη και ευκολότερη στην επίλυσή της. Η επιλογή των  $dt$  και  $dx$  πρέπει εξίσου να ρυθμίζονται ανάλογα με την περίπτωση έτσι ώστε να αποφεύγονται οι μεγάλες κλίσεις των μεγεθών υπολογισμού.

Ωστόσο το "VSFModel" αποτελεί μία **αξιόπιστη** και **γρήγορη εκτίμηση** της συμπεριφοράς της ροής ύδατος και μεταφοράς ρύπου στην ακόρεστη και κορεσμένη ζώνη, παρόλο που θεωρούνται αμελητέοι οι όροι της εξάτμισης, της διαπνοής και απορρόφησης ύδατος από τις ρίζες των φυτών.

Το τελευταίο και σε συνδυασμό με το γεγονός ότι το γραφικό περιβάλλον είναι αρκετά εύχρηστο και αυτόνομο (εκτελέσιμο και εκτός Matlab), καθιστά το "VSFModel" ένα καλό εργαλείο μελέτης πεδίων υπόγειων υδροφορέων, μιας και οι περισσότεροι αλγόριθμοι είναι πολύπλοκοι στη χρήση τους και απαιτούν πλήθος φυσικών και εμπειρικών παραμέτρων τις οποίες αρκετές φορές είναι δύσκολο να υπολογίσουμε.

Η σύνταξη του αλγορίθμου – όπως χρήση δομών δεδομένων – επιτρέπει την αναβάθμισή του χωρίς αλλαγή του ήδη υπάρχον κώδικα. Έτσι η δυνατότητα εισαγωγής πολλαπλών στρωμάτων και στην κορεσμένη ζώνη, η δυνατότητα επιλογής διαφορετικών συνοριακών συνθηκών, η δυνατότητα επιλογής διαφορετικού τύπου κορεσμένης ζώνης (ελεύθερης ή περιορισμένης) ή ακόμη και η χρήση των όρων χημικής αντίδρασης στις εξισώσεις μεταφοράς ρύπων, θα καθιστούσε το "VSFM" ακριβέστερο προσομοιωτή.

**ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ****Ελληνική**

1. Αγιουτάντης, Ζ.Γ., 2002. Στοιχεία Γεωμηχανικής, Μηχανική Πετρωμάτων, Εκδόσεις Ίων, Αθήνα.
2. Καρατζάς, Γ.Π., 2006. Ροή υπογείων υδάτων και μεταφορά ρύπων. Πανεπιστημιακές παραδόσεις, Τμήμα Μηχανικών Περιβάλλοντος, Πολυτεχνείο Κρήτης, Χανιά.
3. USGS, 2006b. Ο υδρολογικός κύκλος, Γεωλογική Υπηρεσία ΗΠΑ, Ελληνικό κείμενο: Χρ. Μακρόπουλος και Δ. Κουτσογιάννης, website: <http://ga.water.usgs.gov/edu/watercyclegreek.html> (τελευταία πρόσβαση: Απρίλιος 2006).

**Διεθνής**

1. Carnahan, B., H.A. Luther and J.O. Wilkes, 1969. Applied Numerical Methods. John Wiley & Sons Inc, USA.
2. Hari Prasad, K.S., M.S. Mohan Kumar, Skhar and M. Sadhana, 2001. Modeling flow through unsaturated zones: Sensitivity to unsaturated soil properties, Vol. 26, Part 6, December 2001.
3. Lesage, S. and R. Jackson, 1992. Groundwater Contamination and Analysis at Hazardous Waste Sites.
4. Mansell, R.S., Ma Liwang, L.R. Ahuja and S.A. Bloom, 2002. Adaptive grid refinement in numerical models for water flow and chemical transport in soil: A review. Vadose Zone Journal, (1) pp. 222-238.
5. Mohanty, B.P. and M.Th. van Genuchten, 1996. An integrated approach for modeling water flow and solute transport in the vadose zone. Soil Science Society of America (SSSA), Special Publication 48.
6. Tindall, J.A. and J.R. Kunkel, 1999. Unsaturated Zone Hydrology for

Scientists and Engineers, Prentice Hall.

7. USGS, 2006a. Unsaturated-Zone Flow: Definitions and Details, website: <http://wwwrcamnl.wr.usgs.gov/uzf/unsatflow.html> (τελευταία πρόσβαση: Απρίλιος 2006).
8. VADOSE/W, 2002. Vadose/W for comprehensive vadose zone analysis, version 1, User's Guide, GEO-SLOPE International Ltd., Calgary, Alberta, Canada.
9. van Dam, J.C. and R.A. Feddes, 2000. Numerical simulation of infiltration, evaporation and shallow groundwater levels with the Richards equation. *Journal of Hydrology*, 233, pp. 72-85.
10. van Genuchten, M.Th., 1982. A comparison of numerical solutions of one-dimensional saturated-unsaturated flow and mass transport equations. *Adv. Water Resources*, Volume 5, pp. 47-55.
11. <http://www.mines.edu/~epoeter/583/13/discussion/courant.htm>, (τελευταία πρόσβαση: Απρίλιος, 2006).