

ΣΗΜΕΙΩΣΕΙΣ ΓΙΑ ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ ΓΙΑ ΤΟ
ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ

Χρήστος Νικολόπουλος

Περιεχόμενα

1	ΜΕΘΟΔΟΙ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗΣ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗΣ	6
1.1	Διαστατική Ανάλυση - Κανονικοποίηση	7
1.1.1	Μέθοδοι Διαστατικής Ανάλυσης	7
1.1.2	Κανονικοποίηση	13
1.2	Εξισώσεις Διάχυσης	16
1.3	Παραγωγή της Εξίσωσης Laplace και οι Εξισώσεις του Maxwell	23
1.4	Μέθοδοι Διαταραχών	25
1.4.1	Κανονική Διαταραχή	25
1.4.2	Μέθοδος Πολλαπλών Κλιμάκων	29
1.5	Στοιχεία Ασυμπτωτικής Ανάλυσης	30
1.6	Θεωρία Οριακού Στρώματος	32
1.7	Κινητική Χημικών Αντιδράσεων	36
1.7.1	Αντίδραση Michaelis - Menton Κινητική ενζύμων	41
1.8	Παράδειγμα Χημικής Αντίδρασης Κανονικοποίηση - Οριακό στρώμα	43
2	ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΜΕ Ε- ΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΤΟ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ	48
2.1	Μαθηματικά μοντέλα για το φαινόμενο του θερμοκηπίου	49
2.1.1	Θερμοκρασιακές μεταβολές της Γής	49
2.1.2	Προσωρινές μεταβολές	50
2.1.3	Χωρικές μεταβολές	52
2.1.4	Θερμικές μεταβολές λόγω του φαινομένου του θερμοκηπίου	53
2.1.5	Θεμελιώδης λύση για τη εξίσωση της θερμότητας	56
2.1.6	Ο κύκλος του άνθρακα στην ατμόσφαιρα Carbon Box Model	60
2.2	Διασπορά Καπνού από Ψηλή Καμινάδα	68
2.3	Διάχυση μόλυνσης σε μια λίμνη	72
2.4	Ροή υπόγειων υδάτων	75
2.4.1	Εξισώσεις κίνησης ρευστών	75
2.4.2	Κίνηση υπόγειων υδάτων	79
2.4.3	Εξισώσεις ροής	82
2.4.4	Εξίσωση μεταφοράς μολυσματικού διαλύματος	85

2.4.5	Ρόφηση, επιβράδυνση και αντιδράσεις	86
2.5	Η εξίσωση πορώδους υλικού	90

Πρόλογος

Ο στόχος των σημειώσεων αυτών είναι να αποτελέσουν τη βάση για τη διδασκαλία του μαθήματος “Μαθηματικά Μοντέλα για τις Περιβαλλοντικές Επιστήμες” του Μεταπτυχιακού προγράμματος Σπουδών “Μαθηματική Μοντελοποίηση στις φυσικές Επιστήμες και στις Σύγχρονες Τεχνολογίες” του Μαθηματικού τμήματος του Πανεπιστημίου Αιγαίου.

Το θέμα είναι εξαιρετικά ευρύ και σε καμία περίπτωση δεν μπορεί να καλυφθεί πλήρως από ένα μόνο διδακτικό εγχειρίδιο. Παρόλα αυτά στις παρούσες σημειώσεις γίνεται μια προσπάθεια να δοθεί μια παρουσίαση των βασικών τεχνικών της μαθηματικής μοντελοποίησης και των εφαρμογών τους σε προβλήματα που προκύπτουν στη μελέτη του περιβάλλοντος. Έτσι αρχικά στο Κεφάλαιο 1 γίνεται μια παρουσίαση των βασικών τεχνικών της μαθηματικής μοντελοποίησης : Διαστατική ανάλυση - Κανονικοποίηση - Μέθοδοι διαταραχής. Επιπλέον παρουσιάζονται οι πιο σημαντικές μερικές διαφορικές εξισώσεις που αφορούν φαινόμενα διάχυσης. Με αυτό το τρόπο ο αναγνώστης μπορεί να δει τη διαδικασία της μοντελοποίησης και της παραγωγής εξισώσεων από απλές βασικές αρχές και παράλληλα παρουσιάζεται ένα σύνολο εξισώσεων - μοντέλων που μπορούν να εφαρμοστούν άμεσα σε πιο ειδικές περιπτώσεις, όπως σε αυτές που προκύπτουν από τα προβλήματα στη μελέτη περιβαλλοντικών φαινομένων. Τέλος στο Κεφάλαιο 2 παρουσιάζονται συγκεκριμένα παραδείγματα μαθηματικών μοντέλων (case studies) για το περιβάλλον.

Απαραίτητη προϋπόθεση για την κατανόηση των σημειώσεων αυτών είναι οι βασικές γνώσεις σε Συνήθειες και Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις.

Οι αναφορές που χρησιμοποιήθηκαν για τη συγγραφή αυτών των σημειώσεων είναι οι εξής :

Για το Κεφάλαιο 1 χρησιμοποιήθηκαν οι αναφορές [2] [4], [3] και [6], [1].

Για το Κεφάλαιο 2 οι αναφορές [2], [4] [7],[6] και [5]

Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον φίλο και συνάδελφο Θεόδωρο Μιχαλακόπουλο, Λέκτορα του τμήματος Μεταλλειολόγων Μηχανικών, ΕΜΠ για τις διορθώσεις και συστάσεις του, από την ιδιαίτερα χρήσιμη οπτική γωνία ενός μηχανικού, όσον αφορά στο περιεχόμενο των σημειώσεων αυτών και τη φιλόλογο Γεωργία Γαλάνη για τις διορθώσεις της όσον αφορά στη γλώσσα του κειμένου. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τους φοιτητές του μεταπτυχιακού κύκλου σπουδών στο Μαθηματικό τμήμα του Πανεπιστημίου Αιγαίου για τις παρατηρήσεις τους κατά τη διδασκαλία του μαθήματος “Μαθηματικά Μοντέλα για τις Περιβαλλοντικές Επιστήμες”.

Εισαγωγή

Ο σκοπός της μαθηματικής μοντελοποίησης είναι να κατασκευάσουμε, να καταστρώσουμε λογικές χρήσιμες εξισώσεις (μαθηματικά μοντέλα) που αναπαριστούν διαδικασίες που συμβαίνουν στον πραγματικό κόσμο. Αυτές μπορεί να μοντελοποιούν διαδικασίες στη φυσική, στη χημεία, στη βιολογία, στα οικονομικά, στη βιομηχανική παραγωγή, στις περιβαλλοντικές επιστήμες κ.τ.λ.

Γενική Ιδέα Η κατασκευή ενός μαθηματικού μοντέλου μπορεί να περιγραφεί ως εξής :

- α) Προσπαθούμε να κατανοήσουμε τη φυσική διαδικασία. Καθορίζουμε τα βασικά χαρακτηριστικά της.
- β) Γράφουμε εξισώσεις για την ομαδοποίηση αυτών των χαρακτηριστικών σε μαθηματική μορφή. Μπορεί να έχουμε περιπτώσεις όπου γνωρίζουμε τους φυσικούς νόμους που περιγράφουν το φαινόμενο, δηλαδή υπάρχει κάποια σχετική μαθηματική θεωρία από πριν. Σε περίπτωση που αυτοί οι νόμοι είναι περίπλοκοι μπορεί να χρειάζεται να κατασκευάσουμε εξισώσεις από την αρχή, ή να χρησιμοποιήσουμε φυσική διαίσθηση ή μαθηματική απλοποίηση. Σαν τελικό αποτέλεσμα χρειαζόμαστε ένα επιλύσιμο πρόβλημα επαρκές να δώσει ένα ρεαλιστικό μοντέλο. Πιο συγκεκριμένα το ζητούμενο είναι ότι οι εξισώσεις αυτές με κάποιο τρόπο πρέπει να λύνονται.
- γ) Συγκρίνουμε τη λύση με πειραματικά δεδομένα. Βελτιώνουμε το μοντέλο, εάν αυτό χρειάζεται. Το απλοποιούμε περαιτέρω ή και συμπεριλαμβάνουμε περισσότερα χαρακτηριστικά. Αρχίζουμε τη διαδικασία από την αρχή (βήμα (α)) μέχρι να έχουμε ένα ικανοποιητικό αποτέλεσμα.

Οι μέθοδοι στις οποίες βασιζόμαστε είναι οι εξής :

- α) Φυσικές αρχές π.χ. διατήρηση μάζας, ορμής κ.τ.λ.
- β) Διαστατική ανάλυση και κανονικοποίηση.
- γ) Χρησιμοποιούμε τις εξισώσεις με απλοποίηση εφαρμόζοντας ασυμπτωτική ανάλυση και μεθόδους διαταραχών.
- δ) Θέτουμε αξιωματικά εξισώσεις οι οποίες περιμένουμε να αντιπροσωπεύουν βασικά χαρακτηριστικά.

Παράδειγμα Κατασκευής Μαθηματικού μοντέλου: Μόλυνση σε μια λίμνη

Θεωρούμε ότι έχουμε μια λίμνη σταθερού όγκου V σε κυβικά μέτρα. Επίσης υποθέτουμε ότι είναι μολυσμένη και ότι η μόλυνση είναι ομοιόμορφα κατανομημένη στον όγκο της.

Συμβολίζουμε με $x(t)$ τη συγκέντρωση της μόλυνσης ανά κυβικό μέτρο και έστω r ο ρυθμός με τον οποίο το νερό της λίμνης διαφεύγει από αυτήν (πχ. λόγω εξάτμισης). Για να παραμένει ο όγκος της σταθερός πρέπει να έχουμε και αντίστοιχη εισροή υδάτων στη λίμνη (πχ. λόγω βροχοπτώσεων). Θέλουμε να δούμε, εάν η εισροή μόλυνσης πάψει, σε πόσο χρόνο η λίμνη θα αυτοκαθαριστεί δηλαδή τότε η συγκέντρωση της μόλυνσης θα φτάσει το 5%.

Θα καταστρώσουμε μια εξίσωση που θα συσχετίζει τα φυσικά μεγέθη του προβλήματος μεταξύ τους. Αυτά είναι η συγκέντρωση $x(t)$, ο όγκος V , ο ρυθμός εισροής-εξροής r , και ο χρόνος t .

Έχουμε ότι

Ρυθμός μεταβολής μόλυνσης = Εισροή μόλυνσης - εκροή μόλυνσης,
ή εναλλακτικά ότι

$$\frac{d}{dt}(Vx(t)) = 0 - rx(t),$$

ή

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\frac{r}{V}x(t).$$

Επίσης τη χρονική στιγμή $t = 0$ θεωρούμε ότι στη λίμνη περιέχεται ποσό μόλυνσης $x(0) = x_0$. Επειδή $-\frac{r}{V} < 0$ το μοντέλο μας δίνει εκθετική μείωση για το $x(t)$. Λύνοντας παίρνουμε

$$x(t) = x_0 e^{-\frac{r}{V}t}.$$

Θέλουμε να βρούμε το χρόνο $t = t_c$ για τον οποίο έχουμε $\frac{x(t_c)}{x_0} = 0.05$. Άρα $t_c = -\ln(0.005)\frac{V}{r} = \ln(20)\frac{V}{r} \sim 3\frac{V}{r}$.

Το παραπάνω αποτέλεσμα έχει εφαρμοστεί για τη μελέτη αυτού του φαινομένου στις λίμνες Michigan, Erie και Superior και τα αποτελέσματα συνοψίζονται στο πίνακα που ακολουθεί.

	Michigan	Erie	Superior
V	$4871 \times 10^9 m^3$	$458 \times 10^9 m^3$	$1921 \times 10^9 m^3$
r	$433092096 lt/sec$	$479582208 lt/sec$	$178619904 lt/sec$
t_c	7.8 χρόνια	92 χρόνια	562 χρόνια

Κεφάλαιο 1

ΜΕΘΟΔΟΙ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗΣ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗΣ

1.1 Διαστατική Ανάλυση - Κανονικοποίηση

Οι τεχνικές της διαστατικής ανάλυσης και της κανονικοποίησης παίζουν βασικό ρόλο στη θεμελίωση και τις εφαρμογές των μαθηματικών μοντέλων.

Η καλή αντίληψη του σχετικού μεγέθους των διάφορων φυσικών παραμέτρων και η αναγνώριση πιθανών σχέσεων μεταξύ τους μας οδηγούν στην καλύτερη κατανόηση του προβλήματος και μας υποδεικνύουν τρόπους προσέγγισης των λύσεων ή και της ακριβούς επίλυσής του.

Δεδομένου ενός εμπειρικού προβλήματος το πρώτο στάδιο επίλυσης είναι η διατύπωση ενός μαθηματικού μοντέλου που το περιγράφει. Αυτό περιλαμβάνει τον ορισμό των μεγεθών που υπεισέρχονται στο πρόβλημα και τη διατύπωση ενός συνόλου εξισώσεων οι οποίες το διέπουν και το περιγράφουν λεπτομερώς. Επίσης οι εξισώσεις του προβλήματος πρέπει να είναι διαστατικά ομογενείς, δηλαδή οι διαστάσεις στα δυο μέλη της κάθε εξίσωσης πρέπει να είναι ίδιες.

Η διαστατική ανάλυση μας επιτρέπει να κατανοήσουμε τις διαστατικές σχέσεις (μήκους, χρόνου, μάζας, κ.τ.λ.) μεταξύ των ποσοτήτων στην εξίσωση και τις συνέπειες της διαστατικής ομογένειας που θα πρέπει να ισχύει.

Η κανονικοποίηση μας βοηθάει να εκτιμήσουμε το σχετικό μέγεθος των όρων που εμφανίζονται στις εξισώσεις του μοντέλου (άρα και στη σωστή αναζήτηση ασυμπτωτικών λύσεων).

1.1.1 Μέθοδοι Διαστατικής Ανάλυσης

Οι εξισώσεις έχουν μια εσωτερική συνέπεια που δεν επιτρέπει στις μεταβλητές να σχετίζονται με οποιονδήποτε τρόπο. Οι εξισώσεις πρέπει να είναι διαστατικά ομογενείς.

Το βασικό αποτέλεσμα της διαστατικής ανάλυσης είναι το θεώρημα του π. Αυτό μας λέει ότι αν ένας φυσικός νόμος δίνει μια σχέση μεταξύ διάφορων φυσικών μεγεθών τότε υπάρχει ένας ισοδύναμος νόμος που συσχετίζει ορισμένες αδιάστατες ποσότητες που προκύπτουν από αυτά τα μεγέθη.

Παράδειγμα Έστω ένα φυσικό σύστημα που περιγράφεται από ένα νόμο της μορφής $f(E, P, A) = 0$ όπου E είναι η ενέργεια, P η πίεση, A το εμβαδόν. Θέλουμε ένα νόμο που συσχετίζει αυτές τις ποσότητες μεταξύ τους. Έχουμε $[E] = M \frac{L^2}{T^2}$, $[P] = \frac{M}{L T^2}$, και $[A] = L^2$, όπου με $[x]$ συμβολίζουμε τις μονάδες του μεγέθους x , και με M, L, T συμβολίζουμε τις μονάδες μάζας, μήκους και χρόνου αντίστοιχα. Προσπαθούμε να συνδυάσουμε αυτά τα τρία μεγέθη μεταξύ τους έτσι ώστε να συμφωνούν οι μονάδες στα δύο μέλη της εξίσωσης. Πρέπει $[E] = [P][A]^a$, για κατάλληλο a , άρα έχουμε $M \frac{L^2}{T^2} = \frac{M}{L T^2} L^{2a}$, ή $L^3 = L^{2a}$ οπότε $a = \frac{3}{2}$. Άρα τελικά ο νόμος που συνδέει αυτά τα μεγέθη πρέπει να είναι της μορφής

$$\frac{PA^{\frac{3}{2}}}{E} = \text{σταθερά.}$$

Παράδειγμα Η ταχύτητα κυμάτων επιφάνειας, v σε θάλασσα μεγάλου βάθους συσχετίζεται με το μήκος κύματος l και την επιτάχυνση της βαρύτητας g . Θέλουμε να διερευνήσουμε τη σχέση που μπορούμε να έχουμε για τα μεγέθη v , l , g . Έχουμε $[v] = \frac{L}{T}$, $[l] = L$, $g = \frac{L}{T^2}$. Παρατηρούμε ότι $[v]^2 \frac{1}{l} = [g]$. Άρα μια σχέση που συνδέει αυτά τα τρία μεγέθη είναι

$$\frac{v^2}{gl} = \text{σταθερά} \quad \text{ή} \quad v = \text{σταθερά} \times \sqrt{gl}.$$

Παράδειγμα - Ο νόμος του Stokes για τη σφαίρα. Θεωρούμε μία σφαίρα ακτίνας a η οποία κινείται αργά μέσα σε ένα ρευστό, ιξώδους μ , με ταχύτητα u . Θέλουμε να δούμε τι μορφή έχει η δύναμη αντίστασης από το ρευστό στην κίνηση της σφαίρας. Έχουμε $[a] = L$, $[u] = \frac{L}{T}$, $[\mu] = \frac{M}{LT}$ ενώ για τη δύναμη αντίστασης F έχουμε $[F] = \frac{ML}{T^2}$. Ο σκοπός είναι να προσδιορίσουμε μία σχέση της μορφής $F = g(a, u, \mu)$. Μπορούμε να απαλείψουμε τις μονάδες μάζας M από την F παίρνοντας τον λόγο $\frac{F}{\mu}$, και $[\frac{F}{\mu}] = \frac{L^2}{T^2}$. Απο αυτόν τον λόγο μπορούμε να απαλείψουμε τις μονάδες χρόνου διαιρώντας με τη ταχύτητα u , και έχουμε $[\frac{F}{\mu u}] = L$. Αυτή η ποσότητα γίνεται αδιάστατη αν διαιρέσουμε με την ακτίνα a , οπότε $[\frac{F}{\mu u a}] = 1$. Άρα τελικά ο ζητούμενος νόμος είναι της μορφής $\frac{F}{\mu u a} = c$ όπου c μια σταθερά (αδιάστατη) και

$$F = c\mu u a.$$

Αυτός είναι ο νόμος του *Stokes* για τη σφαίρα.

Παράδειγμα - Εκτίμηση της ισχύος της 1ης ατομικής βόμβας. Θεωρούμε ότι έχουμε ένα μεγάλο ποσό ενέργειας e που εκλύεται σε μικρό χρονικό διάστημα, δηλαδή στιγμιαία, σε πρακτικά μικρή έκταση (σε ένα σημείο). Έχουμε τη στιγμή της έκρηξης ένα ισχυρό κρουστικό κύμα από το σημείο της έκρηξης προς τα έξω. Η πίεση της έκρηξης είναι της τάξης εκατοντάδων χιλιάδων *atm*, πολύ μεγαλύτερη από την ατμοσφαιρική πίεση. Θα πρέπει να υπάρχει σχέση της ακτίνας r , του μετώπου, του χρόνου t , της αρχικής πυκνότητας του αέρα ρ και της ενέργειας e που εκλύεται. Αναζητούμε τη μορφή μιας τέτοιας σχέσης $g(t, r, \rho, e) = 0$.

Έχουμε $[t] = T$, $[r] = L$, $[e] = M \frac{L^2}{T^2}$. Παρατηρούμε ότι αν θεωρήσουμε το λόγο $\frac{r^5 \rho}{t^2 e}$ έχουμε ότι $[\frac{r^5 \rho}{t^2 e}] = \frac{L^5 M}{T^2 L^3 M L^2} = 1$. Επομένως η ποσότητα $\frac{r^5 \rho}{t^2 e}$ είναι αδιάστατη και πρέπει να ισχύει ότι $f(\frac{r^5 \rho}{t^2 e}) = 0$, για κάποια συνάρτηση f η εναλλακτικά ότι $\frac{r^5 \rho}{t^2 e} = c$ για κάποια σταθερά c και επομένως η ακτινική απόσταση του κρουστικού κύματος δίνεται από τη σχέση

$$r = c \left(\frac{et^2}{\rho} \right)^{\frac{1}{5}}.$$

Η μέθοδος αυτή που είδαμε στα παραπάνω παραδείγματα μπορεί να γενικευτεί. Γενικά αν έχουμε ένα φυσικό νόμο της μορφής $f(q_1, q_2, \dots, q_m) = 0$ που

συσχετίζει τις ποσότητες q_1, q_2, \dots, q_m τότε αυτός είναι ισοδύναμος με ένα φυσικό νόμο της μορφής $g(\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_\nu) = 0$ όπου τα $\pi_i, i = 1 \dots \nu < m$ προκύπτουν από τα q_i και είναι αδιάστατα.

Πιο συγκεκριμένα τα q_i εκφράζονται συναρτήσει θεμελιωδών μεγεθών (πχ. μήκους, μάζας, κ.τ.λ.) $L_i, i = 1 \dots n, n < m$. Για τις διαστάσεις του μεγέθους q_i έχουμε $[q_i] = L_1^{a_{1i}} L_2^{a_{2i}} \dots L_n^{a_{ni}}$. Η ποσότητα q_i είναι αδιάστατη αν $[q_i] = 1$, ($a_{1i} = a_{2i} = \dots = a_{ni} = 0$).

Ο $n \times m$ πίνακας A ,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{1m} \\ a_{21} & \dots & a_{2m} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix},$$

λέγεται πίνακας διαστάσεων. Τα στοιχεία της i στήλης είναι οι εκθέτες των διαστάσεων του q_i ως προς τα L_1, \dots, L_n .

Υποθέτουμε ότι ο νόμος $f(q_1, q_2, \dots, q_m) = 0$ είναι ανεξάρτητος από το σύστημα μονάδων μέτρησης που χρησιμοποιούμε, δηλαδή είναι ελεύθερος μονάδων. Εάν L_i είναι ένα θεμελιώδες μέγεθος σε ένα σύστημα μονάδων τότε σε ένα άλλο έχει τη μορφή \bar{L}_i όπου $\bar{L}_i = \lambda_i L_i, i = 1 \dots n, \lambda_i \in \mathbb{R} > 0$. Αν $[q] = L_1^{b_1} L_2^{b_2} \dots L_n^{b_n}$ τότε $\bar{q} = \lambda_1^{b_1} \lambda_2^{b_2} \dots \lambda_n^{b_n} q$ και αν $f(q_1, q_2, \dots, q_m) = 0 \Leftrightarrow f(\bar{q}_1, \bar{q}_2, \dots, \bar{q}_m) = 0$, για κάθε επιλογή πραγματικών αριθμών $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n > 0$, τότε ο φυσικός νόμος f λέγεται ελεύθερος μονάδων.

Παράδειγμα Θεωρούμε τον φυσικό νόμο $Q = \sigma T^4$ όπου Q η θερμότητα που απορροφάται από ένα σώμα λόγω ακτινοβολίας, T η θερμοκρασία του σώματος και σ μία σταθερά. Αυτός είναι ο νόμος του Stefan για την παραγωγή θερμότητας από ακτινοβολία. Αυτός ο νόμος είναι ελεύθερος μονάδων. Πράγματι έστω ότι $[Q] = \text{Joule}$, $[\sigma] = \frac{\text{Joule}}{\text{m}^2 \text{K}^4}$, $[T] = \text{K}$. Εάν αλλάξουμε το σύστημα μονάδων έχουμε $\bar{Q} = \lambda_1 Q$, $\bar{\sigma} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2^4} \sigma$, $\bar{T} = \lambda_2 T$, όπου \bar{Q} , $\bar{\sigma}$, \bar{T} τα μεγέθη στο καινούριο σύστημα μονάδων και $\lambda_1, \lambda_2 > 0$ σταθερές. Έχουμε $f(Q, \sigma, T) = 0$ ή $Q - \sigma T^4 = 0 \Leftrightarrow \frac{\bar{Q}}{\lambda_1} - \sigma \frac{\lambda_2^4 \bar{T}^4}{\lambda_2^4} = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{\lambda_1} (\bar{Q} - \bar{\sigma} \bar{T}^4) = 0 \Leftrightarrow \bar{Q} - \bar{\sigma} \bar{T}^4 = 0$. Ο νόμος αυτός παραμένει ίδιος αν αλλάξουμε το σύστημα μονάδων μέτρησης και άρα ο νόμος αυτός είναι ελεύθερος μονάδων.

Παράδειγμα Θεωρούμε τον φυσικό νόμο $f(x, t, g) = x - \frac{1}{2} g t^2 = 0$, όπου x είναι η απόσταση, $[x] = \text{cm}$, t ο χρόνος, $[t] = \text{sec}$, και g η επιτάχυνση της βαρύτητας $[g] = \frac{\text{cm}}{\text{sec}^2}$. Ο νόμος είναι ελεύθερος μονάδων. Πράγματι εάν αλλάξουμε το σύστημα μονάδων και θέσουμε $\bar{x} = \lambda_1 x$, $\bar{t} = \lambda_2 t$, όπου $[\bar{x}] = \text{in}$, $[\bar{t}] = \text{min}$, έχουμε $\lambda_1 = \frac{1}{2.54}$ και $\lambda_2 = \frac{1}{60}$. Επιπλέον $\bar{g} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2^2} g$. Επομένως

$$f(\bar{x}, \bar{t}, \bar{g}) = 0 \Leftrightarrow \bar{x} - \frac{1}{2} \bar{g} \bar{t}^2 = 0 \Leftrightarrow \lambda_1 x - \frac{1}{2} \frac{\lambda_1}{\lambda_2^2} g \lambda_2^2 t^2 = 0 \Leftrightarrow \lambda_1 (x - \frac{1}{2} g t^2) = 0 \Leftrightarrow f(x, t, g) = 0.$$

Τώρα μπορούμε να διατυπώσουμε το θεώρημα π του Buckingham.

Θεώρημα Έστω $f(q_1, q_2, \dots, q_m) = 0$ ένας φυσικός νόμος ελεύθερος μονάδων ο οποίος συσχετίζει τις διαστατικές ποσότητες q_1, q_2, \dots, q_m και L_1, L_2, \dots, L_n , ($n < m$) θεμελιώδη μεγέθη τέτοια ώστε $[q_i] = L_1^{a_{1i}} L_2^{a_{2i}} \dots L_n^{a_{ni}}$, $i = 1, \dots, m$. Έστω A ο πίνακας διαστάσεων με $rank(A) = r$. Τότε υπάρχουν $m - r$ ανεξάρτητες αδιάστατες ποσότητες $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_{m-r}$ που μπορούν να παραχθούν από τα q_1, q_2, \dots, q_m τέτοιες ώστε ο νόμος f να είναι ισοδύναμος με ένα νόμο της μορφής $F(\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_{m-r}) = 0$, δηλαδή με ένα νόμο που εκφράζεται συναρτήσει μόνο των αδιάστατων μεταβλητών.

Ακολουθεί η απόδειξη του θεωρήματος π του Buckingham ([4]).

Απόδειξη Πρέπει να δείξουμε δύο προτάσεις :

α) Από τις ποσότητες q_1, q_2, \dots, q_m σχηματίζονται $m - r$, ($r = rank(A)$) ανεξάρτητες αδιάστατες ποσότητες.

β) Για τις $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_{m-r}$ αδιάστατες ποσότητες ισχύει ότι $f(q_1, q_2, \dots, q_m) = 0 \Leftrightarrow F(\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_{m-r}) = 0$.

α) Έστω π μια αδιάστατη ποσότητα τότε

$$\pi = q_1^{a_1} q_2^{a_2} \dots q_m^{a_m},$$

με $a_i \in \mathbb{Z}$. Εναλλακτικά έχουμε

$$\begin{aligned} 1 = [\pi] &= (L_1^{a_{11}} L_2^{a_{21}} \dots L_n^{a_{n1}})^{a_1} \dots (L_1^{a_{1m}} L_2^{a_{2m}} \dots L_n^{a_{nm}})^{a_m} \\ &= L_1^{a_{11}a_1 + a_{12}a_2 + \dots + a_{1m}a_m} \dots L_n^{a_{n1}a_1 + a_{n2}a_2 + \dots + a_{nm}a_m} \end{aligned}$$

Η παραπάνω σχέση υποδεικνύει ότι πρέπει να ισχύει

$$\begin{aligned} a_{11}a_1 + a_{12}a_2 + \dots + a_{1m}a_m &= 0 \\ a_{21}a_1 + a_{22}a_2 + \dots + a_{2m}a_m &= 0 \\ &\vdots \\ a_{n1}a_1 + a_{n2}a_2 + \dots + a_{nm}a_m &= 0 \end{aligned}$$

Το σύστημα που προκύπτει ως προς τα a_1, a_2, \dots, a_m είναι ομογενές σύστημα n εξισώσεων με m αγνώστους και γνωρίζουμε σε αυτή τη περίπτωση ότι έχουμε $m - r$, $r = rank(A)$, γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις οι οποίες δίνουν και $m - r$ αδιάστατες μεταβλητές.

β) Χωρίς βλάβη της γενικότητας θα θεωρήσουμε ότι $m = 4$, $n = 2$, $r = 2$. Θεωρούμε το νόμο $f(q_1, q_2, q_3, q_4) = 0$ και ότι $[q_j] = L_1^{a_{1j}} L_2^{a_{2j}}$, $j = 1, 2, 3, 4$, όπου τα L_1, L_2 είναι τα θεμελιώδη μεγέθη. Έχουμε

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \end{pmatrix},$$

ο πίνακας διαστάσεων και $r = 2 = rank(A)$. Τότε $\pi = q_1^{a_1} q_2^{a_2} q_3^{a_3} q_4^{a_4}$ όπου τα a_i είναι λύσεις του συστήματος

$$\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{pmatrix} a_1 + \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \end{pmatrix} a_2 + \begin{pmatrix} a_{13} \\ a_{23} \end{pmatrix} a_3 + \begin{pmatrix} a_{14} \\ a_{24} \end{pmatrix} a_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.1)$$

Έστω ότι, χωρίς βλάβη της γενικότητας, τα διανύσματα

$$\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \end{pmatrix}$$

είναι γραμμικά ανεξάρτητα τότε

$$\begin{pmatrix} a_{13} \\ a_{23} \end{pmatrix} = c_{31} \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{pmatrix} + c_{32} \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \end{pmatrix}.$$

Όμοια

$$\begin{pmatrix} a_{14} \\ a_{24} \end{pmatrix} = c_{41} \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{pmatrix} + c_{42} \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \end{pmatrix}.$$

Η σχέση (1.1) γίνεται

$$(a_1 + c_{31}a_3 + c_{41}a_4) \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{pmatrix} + (a_2 + c_{32}a_3 + c_{42}a_4) \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Άρα

$$\begin{aligned} a_1 + c_{31}a_3 + c_{41}a_4 &= 0, \\ a_2 + c_{32}a_3 + c_{42}a_4 &= 0, \end{aligned}$$

και

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = a_3 \begin{pmatrix} -c_{31} \\ -c_{32} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_4 \begin{pmatrix} -c_{41} \\ -c_{42} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Τελικά $\pi_1 = q_1^{-c_{31}} q_2^{-c_{32}} q_3$ και $\pi_2 = q_1^{-c_{41}} q_2^{-c_{42}} q_4$. Στη συνέχεια θεωρούμε το νόμο $G(q_1, q_2, \pi_1, \pi_2) = f(q_1, q_2, \pi_1 q_1^{c_{31}} q_2^{c_{32}}, \pi_2 q_1^{-c_{41}} q_2^{-c_{42}})$ και έχουμε

$$G(q_1, q_2, \pi_1, \pi_2) = 0 \Leftrightarrow f(q_1, q_2, q_3, q_4) = 0.$$

Επιπλέον αφού ο f είναι ελεύθερος μονάδων και ο G είναι ελεύθερος μονάδων. Θέτοντας $\bar{q}_1 = \lambda_1^{a_{11}} \lambda_2 a_{21} q_1$ και $\bar{q}_2 = \lambda_1^{a_{12}} \lambda_2 a_{22} q_2$ για κάποια $\lambda_1, \lambda_2 > 0$ έχουμε ισοδύναμα $G(\bar{q}_1, \bar{q}_2, \pi_1, \pi_2) = 0$. Μπορούμε όμως να επιλέξουμε τα λ_1, λ_2 έτσι ώστε $\bar{q}_1 = 1$ και $\bar{q}_2 = 1$. Πράγματι για $\bar{q}_1 = \lambda_1^{a_{11}} \lambda_2 a_{21} q_1 = 1$ και $\bar{q}_2 = \lambda_1^{a_{12}} \lambda_2 a_{22} q_2 = 1$ ισοδύναμα έχουμε

$$\begin{aligned} a_{11} \ln(\lambda_1) + a_{21} \ln(\lambda_2) &= -\ln(q_1), \\ a_{12} \ln(\lambda_1) + a_{22} \ln(\lambda_2) &= -\ln(q_2). \end{aligned}$$

Το σύστημα αυτό όμως έχει ορίζουσα διάφορη από το μηδέν γιατί οι στήλες του πίνακα του συστήματος είναι γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα και έχει μοναδική λύση. Επομένως για αυτά τα λ_1, λ_2 έχουμε

$$G(\bar{q}_1, \bar{q}_2, \pi_1, \pi_2) = 0 \Leftrightarrow G(1, 1, \pi_1, \pi_2) = 0,$$

και

$$F(\pi_1, \pi_2) = 0 \Leftrightarrow G(1, 1, \pi_1, \pi_2) = 0 \Leftrightarrow f(q_1, q_2, q_3, q_4) = 0.$$

Εφαρμογή σε ένα πρόβλημα διάχυσης. Έστω ότι τη χρονική στιγμή $t = 0$ ένα ποσό θερμικής ενέργειας e βρίσκεται συγκεντρωμένο σε ένα σημείο και αρχίζει να διαχέεται προς τα έξω σε ένα χωρίο με θερμοκρασία $\theta = 0$. Έστω r η ακτινική απόσταση από τη πηγή, t ο χρόνος και u η θερμοκρασία. Υποθέτουμε ότι $u = u(t, r, e, k, c)$ ή $f(u, t, r, e, k, c) = 0$, όπου c ή θερμοχωρητικότητα (ενέργεια/βαθμό και όγκο), k ο συντελεστής θερμικής διάχυσης (μήκος²/χρόνο).

Έχουμε $[t] = T$, $[e] = E$, όπου E είναι μονάδες ενέργειας, $[r] = L$, $[k] = L^2 T^{-1}$, $[u] = \theta$ όπου θ είναι μονάδες θερμοκρασίας, $[c] = E \theta^{-1} L^{-3}$. Ο πίνακας διαστάσεων έχει τη μορφή

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Έχουμε $m = 6$ και $r = 4$ άρα και $m - r = 2$ αδιάστατες μεταβλητές. Θέλουμε να προσδιορίσουμε αυτές τις αδιάστατες μεταβλητές. Εάν π μια αδιάστατη ποσότητα πρέπει

$$\begin{aligned} 1 = \pi &= [t^{a_1} r^{a_2} u^{a_3} e^{a_4} k^{a_5} c^{a_6}] \\ &= T^{a_1} L^{a_2} \theta^{a_3} (L^2 T^{-1})^{a_5} (E \theta^{-1} L^{-3})^{a_6} \\ &= T^{a_1 - a_5} L^{a_2 + 2a_5 - 3a_6} \theta^{a_3 - a_6} E^{a_4 + a_6}. \end{aligned}$$

Έτσι καταλήγουμε στο γραμμικό σύστημα

$$\begin{aligned} a_1 - a_5 &= 0 \\ a_2 + 2a_5 - 3a_6 &= 0 \\ a_3 - a_6 &= 0 \\ a_4 + a_6 &= 0. \end{aligned}$$

Ο πίνακας του συστήματος είναι ο πίνακας διαστάσεων A και με κάποια μέθοδο (πχ. με τη μέθοδο απαλοιφής του Gauss) βρίσκουμε δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις

$$a_1 = -\frac{1}{2}, a_2 = 1, a_3 = 0, a_4 = 0, a_5 = -\frac{1}{2}, a_6 = 0,$$

και

$$a_1 = \frac{3}{2}, a_2 = 0, a_3 = 1, a_4 = -1, a_5 = \frac{3}{2}, a_6 = 1.$$

Αυτές οι δύο λύσεις μας δίνουν δύο αδιάστατες ποσότητες

$$\pi_1 = \frac{r}{\sqrt{kt}}, \quad \pi_2 = \frac{uc}{e} (kt)^{\frac{3}{2}}.$$

Άρα από το θεώρημα π του Buckingham έχουμε

$$f(u, t, r, e, k, c) = 0 \Leftrightarrow F(\pi_1, \pi_2) = 0,$$

ή λύνοντας ως προς π_2 , παίρνουμε $\pi_2 = g(\pi_1)$ για κάποια πραγματική συνάρτηση g . Τελικά λαμβάνοντας υπόψη τη μορφή των π_1, π_2 έχουμε

$$u = \frac{e}{c}(kt)^{-\frac{3}{2}}g\left(\frac{r}{\sqrt{kt}}\right).$$

1.1.2 Κανονικοποίηση

Κανονικοποίηση είναι η διαδικασία της επιλογής νέων συνήθως αδιάστατων μεταβλητών και η επαναδιατύπωση του προβλήματος μέσω αυτών των μεταβλητών. Με αυτό τον τρόπο μπορούμε να συγκρίνουμε την τάξη μεγέθους των όρων σε μία εξίσωση για να παραλείψουμε για παράδειγμα μικρούς όρους. Αυτό βοηθάει στην εφαρμογή των μεθόδων διαταραχών.

Πιο συγκεκριμένα κάθε μεταβλητή σε ένα πρόβλημα χαρακτηρίζεται από την τάξη μεγέθους της σε σχέση με τον τρόπο μέτρησης της. Για παράδειγμα, αν t είναι μια μεταβλητή χρόνου, την οποία μετράμε σε δευτερόλεπτα για την περιγραφή ενός φαινομένου, όπως η κίνηση ενός παγετώνα ή η οξείδωση του σιδήρου, το δευτερόλεπτο είναι πολύ μικρή μονάδα μέτρησης ενώ για τη περιγραφή ενός φαινομένου, όπως μια πυρηνική αντίδραση είναι πολύ μεγάλη μονάδα μέτρησης. Γενικά σε κάθε πρόβλημα έχουμε μια εγγενή κλίμακα χρόνου που την ονομάζουμε χαρακτηριστικό χρόνο αναφοράς, t_c . Η ποσότητα t_c μπορεί να ορισθεί ως το μικρότερο χρονικό διάστημα που απαιτείται για να παρατηρηθούν αναγνωρίσιμες μεταβολές στα φυσικά μεγέθη του προβλήματος. Για παράδειγμα για την κίνηση ενός παγετώνα ο χαρακτηριστικός χρόνος αναφοράς είναι κάποια έτη, ενώ για την πυρηνική αντίδραση είναι χρόνος της τάξης των 10^{-6} sec . Επιπλέον σε ένα πρόβλημα μπορεί να έχουμε περισσότερες από μία κλίμακες χρόνου. Για παράδειγμα μια χημική αντίδραση μπορεί να εξελίσσεται αργά αμέσως μετά την έναρξη της διαδικασίας και για κάποιο χρονικό διάστημα και κατόπιν να έχουμε μια απότομη μεταβολή που την χαρακτηρίζει μια χρονική κλίμακα πολύ μικρότερη σε σχέση με αυτή του αρχικού σταδίου. Αν τώρα γνωρίζουμε τον χαρακτηριστικό χρόνο αναφοράς t_c , τότε μπορούμε να αλλάξουμε την κλίμακα θέτοντας $\tau = \frac{t}{t_c}$, όπου τ είναι η αδιάστατη μεταβλητή για το χρόνο και είναι της τάξης του ένα (οι μεταβολές της κυμαίνονται κοντά στη μονάδα). Την ίδια διαδικασία μπορούμε να εφαρμόσουμε και για τις άλλες μεταβλητές του προβλήματος με στόχο να πάρουμε μία εξίσωση με αδιάστατες μεταβλητές. Οι χαρακτηριστικές ποσότητες αναφοράς προσδιορίζονται από συνδυασμούς διάφορων διαστατικών μεγεθών του προβλήματος και πρέπει να είναι περίπου της ίδιας τάξης μεγέθους με την ποσότητα που χαρακτηρίζουν.

Παράδειγμα Θέλουμε να κατανοήσουμε πως μεταβάλλεται η θερμοκρασία, $T(t)$, μιας χημικής ουσίας μέσα σε ένα κλιβάνο όταν αυτή υπόκειται σε μια εξώθερμη χημική αντίδραση. Υποθέτουμε ότι T_0 είναι η αρχική θερμοκρασία της ουσίας και T_f η θερμοκρασία του κλιβάνου. Η θερμοκρασία της χημικής ουσίας μεταβάλλεται λόγω της έκλυσης θερμότητας από τη χημική αντίδραση που λαμβάνει χώρα στον κλιβάνο αλλά και από την ανταλλαγή θερμότητας της χημικής ουσίας με το σώμα του κλιβάνου. Μπορούμε λοιπόν να διατυπώσουμε ένα νόμο

διατήρησης για τη μεταβολή θερμότητας στον κλίβανο σύμφωνα με τον οποίο η μεταβολή της θερμοκρασίας στη χημική ουσία είναι ίση με την αύξηση θερμοκρασίας λόγω της χημικής αντίδρασης συν τη μεταβολή θερμοκρασίας που οφείλεται στη μεταφορά θερμότητας από τη χημική ουσία στον κλίβανο. Η αύξηση θερμοκρασίας λόγω της χημικής αντίδρασης, $r(T)$, μας δίνεται από τον νόμο του Arrhenious, $r(T) = qe^{A/T}$, ενώ η μεταβολή της θερμοκρασίας λόγω μεταφοράς θερμότητας, $h(T)$ δίνεται από τον νόμο φύξης του Newton, $h(T) = k(T - T_f)$, όπου k η σταθερά μεταφοράς θερμότητας, $[k] = \text{χρόνος}^{-1}$, q η σταθερά της χημικής αντίδρασης, $[q] = \text{θερμοκρασία}/\text{χρόνο}$, και A η σταθερά ενεργοποίησης της χημικής αντίδρασης, $[A] = \text{θερμοκρασία}$. Άρα τελικά

$$\frac{dT}{dt} = qe^{A/T} - k(T - T_f), \quad T(0) = T_0.$$

Διαλέγουμε χαρακτηριστικά μεγέθη από τις σταθερές q, A, T_0, T_f, k . Γενικά για μια εξαρτημένη μεταβλητή χρησιμοποιούμε τη μέγιστη τιμή της στο πρόβλημα ή κάποια άλλη τιμή που είναι της τάξης μεγέθους του μεγίστου της. Θέτουμε $\theta = \frac{T}{T_f}$, δηλαδή παίρνουμε σαν χαρακτηριστικό μέγεθος για τη θερμοκρασία τη θερμοκρασία του κλιβάνου, ενώ θ είναι η αδιάστατη θερμοκρασία.

Κανονικοποιούμε τη χρονική μεταβλητή $\tau = \frac{t}{t_0}$, όπου τ είναι η αδιάστατη μεταβλητή για τον χρόνο. Οι επιλογές για τον χαρακτηριστικό χρόνο t_0 είναι α) $t_0 = \frac{T_f}{q}$ και β) $t_0 = \frac{1}{k}$. Στην πρώτη περίπτωση ο χαρακτηριστικός χρόνος σχετίζεται με τη διαδικασία της αντίδρασης ενώ στη δεύτερη με τη διαδικασία μεταφοράς θερμότητας μεταξύ του κλιβάνου και της χημικής ουσίας. Πιο συγκεκριμένα έχουμε :

α) Έστω $t_0 = \frac{T_f}{q}$ τότε η εξίσωση γίνεται

$$\frac{d\theta}{d\tau} = e^{a/\theta} - \frac{1}{\epsilon}(\theta - 1), \quad \theta(0) = \gamma, \quad (1.2)$$

για $\epsilon = \frac{q}{T_f k}$, $a = A/T_f$ και $\gamma = \frac{T_0}{T_f}$ αδιάστατες μεταβλητές.

β) Έστω $t_0 = \frac{1}{k}$ τότε η εξίσωση γίνεται

$$\frac{d\theta}{d\tau} = \epsilon e^{a/\theta} - \theta + 1, \quad \theta(0) = \gamma. \quad (1.3)$$

Και οι δυο αδιαστατοποιήσεις είναι σωστές. Έστω ότι η χημική αντίδραση είναι πολύ αργή και το q είναι πολύ μικρό σε σχέση με τη σταθερά μεταφοράς θερμότητας, δηλαδή $q \ll kT_f$ και $\epsilon \ll 1$. Τότε στην πρώτη περίπτωση (εξίσωση (1.2)), αν παραλείψουμε τους μικρούς όρους έχουμε $\theta \sim 1$ το οποίο έρχεται σε αντίθεση με την αρχική συνθήκη $\theta(0) = \gamma$ εκτός αν $\gamma = 1$. Άρα προκύπτει μια μη ενδιαφέρουσα προσέγγιση. Στην δεύτερη περίπτωση (εξίσωση (1.3)) έχουμε

$$\frac{d\theta}{d\tau} \simeq 1 - \theta, \quad \theta(0) = \gamma,$$

για την οποία παίρνουμε $\theta = 1 + e^{-t}(\gamma - 1)$. Η κυρίαρχη διαδικασία σε αυτή τη περίπτωση είναι η μεταφορά θερμότητας από τη χημική ουσία και τον κλίβανο

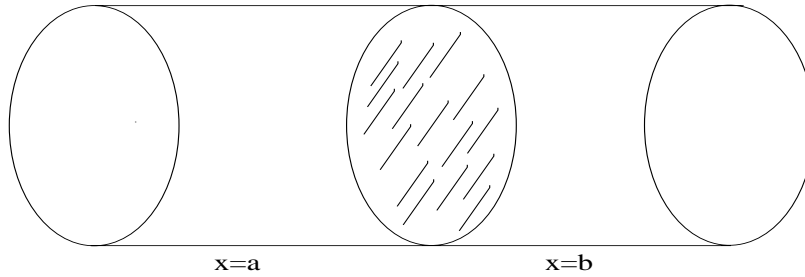
ενώ η χημική αντίδραση έχει αμελητέο ρόλο. Καθώς $t \rightarrow \infty$ έχουμε ότι $\theta \rightarrow 1$ ή $T \rightarrow T_f$.

Βλέπουμε ότι αν πρόκειται να προσεγγίσουμε το πρόβλημα απαλείφοντας μικρούς όρους είναι σημαντικό να επιλέξουμε σωστή κανονικοποίηση. Πολλές φορές για να το επιτύχουμε αυτό γράφουμε το πρόβλημα σε αδιάστατη μορφή χρησιμοποιώντας ένα γενικό όρο αναφοράς, π.χ. t_0 τον οποίο επιλέγουμε κατάλληλα αργότερα, ώστε να αντικατοπτρίζει ακριβώς το σχετικό μέγεθος των όρων της εξίσωσης.

1.2 Εξισώσεις Διάχυσης

Πολλά μοντέλα - θεμελιώδεις εξισώσεις στις φυσικές επιστήμες προέρχονται από νόμους διατήρησης. Ένας νόμος διατήρησης είναι επί της ουσίας ένας νόμος ισοζυγίου που εκφράζει τη διατήρηση μιας ποσότητας σε μια διαδικασία. Παραδείγματα τέτοιων νόμων είναι α) Το πρώτο αξίωμα της θερμοδυναμικής σύμφωνα με το οποίο η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας είναι ίση με τη συνολική θερμότητα συν το έργο που παράγεται. β) Στη περίπτωση που έχουμε ροή ρευστού σε ένα χωρίο που περιέχει χημικές ενώσεις οι οποίες υπόκεινται σε κάποια αντίδραση έχουμε ότι ο ρυθμός μεταβολής της συγκέντρωσης μιας χημικής ένωσης είναι ίσος με το ρυθμό εισροής μείον το ρυθμό εκροής αυτής στο σύστημα συν το ρυθμό παραγωγής ή κατανάλωσης της. γ) Ο ρυθμός μεταβολής ενός πληθυσμού είναι ίσος με το ρυθμό γεννήσεων μείον το ρυθμό θανάτων και μείον τον ρυθμό μετανάστευσης.

Θα διατυπώσουμε το βασικό νόμο διατήρησης. Έστω $u(x, t)$ είναι μέγεθος εξαρτημένο από το $x \in \mathbb{R}$ και το χρόνο $t > 0$. Θεωρούμε ότι η u αντιπροσωπεύει τη πυκνότητα ή συγκέντρωση κάποιας ουσίας πχ. πληθυσμού, μάζας, ενέργειας κτλ. Η ποσότητα u μεταβάλλεται μόνο ως προς μία χωρική κατεύθυνση και κατανέμεται σε ένα σωληνοειδές χωρίο με σταθερή διατομή A .



Σχήμα 1.1: Σωληνοειδές χωρίο.

Έστω $I = [a, b]$ τυχαίο. Η συνολική τιμή της ποσότητας που περιέχεται στο χωρίο I είναι $\int_a^b u(x, t) A dx$. Θεωρούμε ότι έχουμε κίνηση αυτής της ποσότητας στο I . Ορίζουμε ως ροή, η συνάρτηση ροής της u στο x και σε χρόνο t τη συνάρτηση $\phi(x, t)$. Δηλαδή η $\phi(x, t)$ αντιπροσωπεύει το ποσό της u που διέρχεται διαμέσου της διατομής του σωλήνα στο x σε χρόνο t ανα μονάδα χρόνου και επιφάνειας. ($[\phi] = \frac{[u]}{L^2 T}$). Επιπλέον θεωρούμε ότι $\phi(x, t) > 0$ εαν η ροή στο σημείο x είναι κατά τη θετική φορά ενώ $\phi(x, t) < 0$ εάν η ροή στο σημείο x είναι κατά τη αρνητική φορά. Επομένως ο ρυθμός ροής της ποσότητας στο εσωτερικό του χωρίου που καθορίζεται από το διάστημα I είναι $A(\phi(a, t) - \phi(b, t))$.

Τέλος συμβολίζουμε με $f(x, t, u)$ τη συνάρτηση πηγής, δηλαδή το ρυθμό με τον οποίο η u παράγεται ή καταναλώνεται ανά μονάδα όγκου στο σημείο x και σε

χρόνο t . Εάν $f > 0$ τότε η f ονομάζεται πηγή αλλιώς αν $f < 0$ ονομάζεται απαγωγή. Ο ρυθμός παραγωγής η κατανάλωσης της u επομένως είναι $\int_a^b Af(x, t, u)dx$.

Ο θεμελιώδης νόμος διατήρησης για το μέγεθος u μπορεί να διατυπωθεί ως εξής :

Ο χρονικός ρυθμός μεταβολής της συνολικής ποσότητας u στο I είναι ίσος με τον ρυθμό της ποσότητας που ρέει στο χωρίο I συν τον ρυθμό παραγωγής η κατανάλωσης της u στο I .

Επομένως

$$\frac{d}{dt} \int_a^b u(x, t) A dx = A(\phi(a, t) - \phi(b, t)) + \int_a^b Af(x, t, u) dx,$$

ή

$$\frac{d}{dt} \int_a^b u(x, t) dx = \phi(a, t) - \phi(b, t) + \int_a^b f(x, t, u) dx.$$

Αυτός είναι ο νόμος διατήρησης σε ολοκληρωτική μορφή και ισχύει ακόμα και αν οι u , ϕ , f δεν είναι ομαλές συναρτήσεις. Τώρα απο το θεμελιώδες θεώρημα του απειροστικού λογισμού έχουμε ότι $\phi(a, t) - \phi(b, t) = -\int_a^b \frac{\partial \phi}{\partial x}(x, t) dx$ και επιπλέον έχουμε $\frac{d}{dt} \int_a^b u(x, t) dx = \int_a^b \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) dx$ εάν οι u , ϕ είναι αρκετά ομαλές συναρτήσεις. Εάν και η f είναι συνεχής παίρνουμε

$$\int_a^b \left[\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + \frac{\partial \phi}{\partial x}(x, t) - f(x, t, u) \right] dx = 0.$$

Το διάστημα I το επιλέξαμε τυχαία και η ίδια σχέση ισχύει για οποιαδήποτε επιλογή του διαστήματος I άρα ισχύει ότι

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + \frac{\partial \phi}{\partial x}(x, t) - f(x, t, u) = 0, \quad (1.4)$$

για $x \in \mathbb{R}$ και $t > 0$. Αυτός είναι ο νόμος διατήρησης σε διαφορική μορφή.

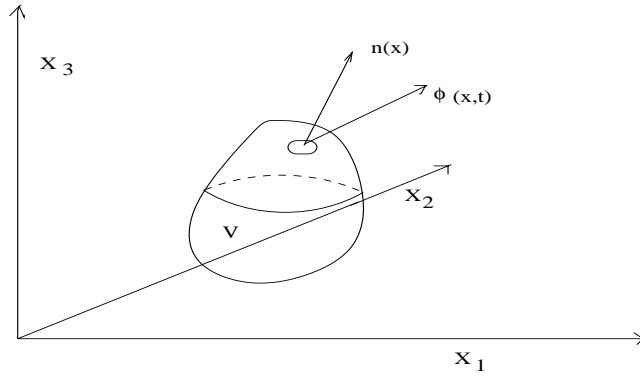
Νόμος διατήρησης σε πολλές διαστάσεις Ο νόμος διατήρησης μπορεί να γενικευτεί για τη μελέτη φαινομένων σε δύο ή τρεις διαστάσεις. Θεωρούμε ένα χωρίο $D \subseteq \mathbb{R}^3$, και $x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$. Έστω $u = u(x, t)$ μία συνάρτηση πυκνότητας και θεωρούμε ένα τυχαίο υποχωρίο V του D , με λείο σύνορο ∂V .

Το συνολικό ποσό που περιέχεται στο V σε αυτή τη περίπτωση θα είναι $\int_V u(x, t) dx$. Επιπλέον το συνολικό ποσό παραγωγής η κατανάλωσης της u στο V θα είναι ίσο με $\int_V f(x, t, u) dx$ για κάποια συνάρτηση f .

Επίσης πρέπει να προσδιορίσουμε τη ροή, την οποία συμβολίζουμε με $\phi(x, t)$, στο σύνορο ∂V του χωρίου. Έστω $n(x)$ το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στο σημείο $x \in \partial V$ με φορά προς τα έξω. Η συνολική ροή μέσω του ∂V θα είναι $\int_{\partial V} \phi(x, t) n(x) ds$ όπου ds είναι μία στοιχειώδη επιφάνεια του ∂V .

Ο νόμος διατήρησης, κατα αναλογία με τη μονοδιάστατη περίπτωση θα έχει τη μορφή

$$\frac{d}{dt} \int_V u(x, t) dx = - \int_{\partial V} \phi(x, t) n(x) ds + \int_V f(x, t, u) dx.$$



Σχήμα 1.2: Αυθέρετο υποχωρίο V .

Επίσης από το θεώρημα απόκλισης έχουμε ότι

$$\int_{\partial V} \phi(x,t)n(x)ds = \int_V \text{div}\phi(x,t)dx,$$

άρα ο νόμος διατήρησης, κατα αναλογία με τη μονοδιάστατη περίπτωση, θα έχει τη μορφή

$$\frac{d}{dt} \int_V u(x,t)dx = - \int_V \text{div}\phi(x,t)dx + \int_V f(x,t,u)dx.$$

ή

$$\int_V \left[\frac{\partial u}{\partial t}(x,t)dx + \text{div}\phi(x,t) - f(x,t,u) \right] dx = 0,$$

το χωρίο V όμως έχει επιλεγεί τυχαία και η παραπάνω σχέση ισχύει για οποιοδήποτε $V \subseteq D$ και επομένως παίρνουμε τη διαφορική μορφή του νόμου διατήρησης

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) + \text{div}\phi(x,t) = f(x,t,u), \quad (1.5)$$

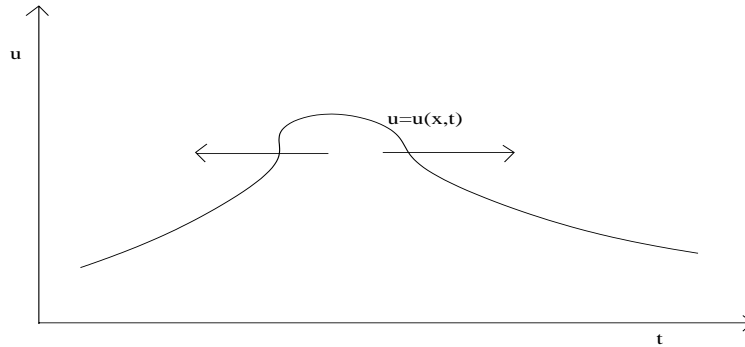
με $x \in D$ και $t > 0$.

Καταστατικές Εξισώσεις Η εξίσωση (1.4) ή η εξίσωση (1.5) είναι μερική διαφορική εξίσωση με δύο αγνώστους τις u και ϕ και χρειαζόμαστε ακόμα μία εξίσωση προκειμένου να πάρουμε ένα επαρκώς προσδιορισμένο πρόβλημα. Μία τέτοια εξίσωση η οποία συσχετίζει τις αγνώστους u και ϕ ονομάζεται καταστατική εξίσωση. Τέτοιες εξισώσεις συνήθως βασίζονται σε εμπειρικά αποτελέσματα και σε υποθέσεις σχετικά με τις φυσικές ιδιότητες του μέσου.

Εξίσωση Διάχυσης Θεωρούμε το νόμο διατήρησης σε μία διάσταση χωρίς πηγείο όρο, $f = 0$,

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) + \frac{\partial \phi}{\partial x}(x,t) = 0, \quad (1.6)$$

με $x \in \mathbb{R}$, $t > 0$. Πολλές φορές το ποσό που ρέει διαμέσου μίας διατομής στο σημείο x στο χρόνο t είναι ανάλογο της κλίσης της u στο σημείο αυτό, δηλαδή $\phi \propto u_x$. Επιπλέον η ροή έχει κατεύθυνση από σημεία με μεγαλύτερη πυκνότητα προς σημεία με μικρότερη πυκνότητα. Για παράδειγμα η θερμότητα ρέει από περιοχές με μεγαλύτερη θερμοκρασία προς περιοχές με μικρότερη θερμοκρασία (Αυτός είναι ο δεύτερος νόμος της θερμοδυναμικής) ή αν το u αναπαριστά πληθυσμό έχουμε ροή από περιοχές με μεγαλύτερη προς περιοχές με μικρότερη συγκέντρωση πληθυσμού.



Σχήμα 1.3: Κατεύθυνση ροής σε σχέση με τη κλίση της u .

Επομένως σε αυτές τις περιπτώσεις η καταστατική εξίσωση παίρνει τη μορφή

$$\phi(x, t) = -D \frac{\partial u}{\partial x}(x, t), \quad (1.7)$$

για κάποια σταθερά D η οποία ονομάζεται σταθερά διάχυσης και σχετίζεται με τη ταχύτητα του φαινομένου της διάχυσης ($[D] = \frac{L^2}{T}$). Η εξίσωση αυτή είναι ο νόμος του Fick.

Συνδυάζοντας τις εξισώσεις (1.6), (1.7) παίρνουμε την εξίσωση της διάχυσης

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t). \quad (1.8)$$

Αξίζει να σημειώσουμε εδώ ότι η σταθερά D καθορίζει ένα χρόνο αναφοράς για τη διαδικασία. Πράγματι αν l είναι ένα χαρακτηριστικό μήκος τότε αυτός ο χρόνος αναφοράς είναι $t_0 = \frac{l^2}{D}$.

Η εξίσωση της θερμότητας Στη περίπτωση όπου η ποσότητα u αναπαριστά θερμότητα, πχ. σε ένα τρισδιάστατο χωρίο, με όμοιο τρόπο όπως για την εξίσωση της διάχυσης μπορούμε να παράγουμε την εξίσωση της θερμότητας. Για λόγους πληρότητας επαναλαμβάνουμε τα βασικά βήματα της διαδικασίας.

Έστω ένα χωρίο $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ το οποίο είναι ομογενές και ισότροπο όσον αφορά στη θερμική συμπεριφορά του. Συμβολίζουμε με $T(x, t)$ τη θερμοκρασία σε ένα σημείο $x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ τη χρονική στιγμή t .

Θεωρούμε ένα χωρίο D αυθαίρετο υποχωρίο του $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Έστω c η θερμοχωρητικότητα του υλικού και ρ η πυκνότητα του και υποθέτουμε ότι αυτές είναι σταθερές. Το συνολικό ποσό θερμότητας που περιέχεται στο χωρίο D θα είναι

$$\int_D \rho c T(x, t) dx.$$

Έστω $n(x)$ το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια ∂D στο σημείο x με φορά έξω από το χωρίο. Τότε η συνολική ροή θερμότητας μέσω του ∂D θα είναι

$$\int_{\partial D} q(x, t) n(x) dS,$$

όπου $q(x, t)$ είναι η ροή θερμότητας, δηλαδή το ποσό θερμότητας που διέρχεται ανά μονάδα επιφάνειας και χρόνου και dS το στοιχείο επιφάνειας του ∂D .

Επίσης συμβολίζουμε με $f(x, t)$ το ποσό της θερμότητας που παράγεται ή καταναλώνεται λόγω κάποιας πηγής ή απαγωγής (π.χ. λόγω του ότι λαμβάνει χώρα κάποια χημική αντίδραση).

Σύμφωνα με το νόμο διατήρησης της ενέργειας η μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας του χωρίου πρέπει να είναι ίση με την θερμότητα που εισέρχεται ή εξέρχεται από το σύνορό του συν το ποσό της θερμότητας που εκλύεται η απορροφάται λόγω πηγών ή απαγωγών. Έτσι ο νόμος διατήρησης στην προκειμένη περίπτωση θα έχει τη μορφή

$$\frac{d}{dt} \int_D \rho c T(x, t) dx = - \int_{\partial D} q(x, t) n(x) dS + \int_D f(x, t) dx. \quad (1.9)$$

Από το θεώρημα απόκλισης έχουμε ότι

$$\frac{d}{dt} \int_D \rho c T(x, t) dx = - \int_D \operatorname{div}(q(x, t)) dx + \int_D f(x, t) dx.$$

Επειδή το χωρίο D είναι τυχαίο και οι συναρτήσεις T, q, f θεωρούμε ότι είναι συνεχείς παίρνουμε το νόμο διατήρησης:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho c T(x, t)) + \operatorname{div}(q(x, t)) = f(x, t). \quad (1.10)$$

Η ροή θερμότητας h συνδέεται με τη θερμοκρασία μέσω μίας καταστατικής εξίσωσης. Αυτή είναι στη προκειμένη περίπτωση ο νόμος του Fourier (κατάναλο-γία με το νόμο του Fick στη γενική περίπτωση) σύμφωνα με τον οποίο η κλίση της θερμοκρασίας είναι ανάλογη της ροής

$$q(x, t) = -k \nabla T(x, t), \quad (1.11)$$

όπου η σταθερά k είναι ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας. Χρησιμοποιώντας την καταστατική σχέση (1.11) στην εξίσωση (1.10) παίρνουμε την εξίσωση της θερμότητας

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t}(x, t) = k \Delta T(x, t) + f(x, t),$$

η οποία στην περίπτωση που δεν έχουμε πηγές ή απαγωγές, $f = 0$, αυτή γίνεται

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t}(x, t) = k \Delta T(x, t). \quad (1.12)$$

Εξίσωση Αντίδρασης - Διάχυσης Εάν σε ένα πρόβλημα έχουμε πηγές, δηλαδή $f \neq 0$ και επιπλέον ο πηγαίος όρος εξαρτάται από τη u , πράγμα που απαντάται πολύ συχνά σε φαινόμενα χημικών αντιδράσεων, ο νόμος διατήρησης σε μία διάσταση έχει τη μορφή

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + \frac{\partial \phi}{\partial x}(x, t) = f(x, t, u). \quad (1.13)$$

Εφαρμόζοντας το νόμο του Fick παίρνουμε την εξίσωση αντίδρασης διάχυσης

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) + f(x, t, u).$$

Σε πολλές περιπτώσεις ο πηγαίος όρος f έχει τη μορφή $f = f(u) = e^{u(x,t)}$, $f = f(u) = e^{-u(x,t)}$ ή $f = f(u) = u^p(x, t)$, $p \geq 2$.

Εξίσωση Fisher Ένα πολύ καλό μοντέλο για την εξέλιξη ενός πληθυσμού είναι η γνωστή λογιστική εξίσωση

$$\frac{du}{dt} = ru \left(1 - \frac{u}{K}\right),$$

όπου $u = u(t)$ είναι ο πληθυσμός και οι σταθερές $r > 0$ και $K > 0$ είναι ο ρυθμός αύξησης και η φέρουσα ικανότητα αντίστοιχα.

Εάν θεωρήσουμε ότι η πυκνότητα του πληθυσμού εξαρτάται και από το χώρο $u = u(x, t)$ στον οποίο έχουμε διάχυση του, τότε ένα καλό μοντέλο είναι η εξίσωση Fisher

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) + ru(x, t) \left(1 - \frac{u(x, t)}{K}\right).$$

Εξίσωση Διάχυσης - Μεταφοράς Στην περίπτωση που έχουμε διάχυση της ποσότητας u σε ένα σώμα το οποίο κινείται, με κάποια ταχύτητα v τότε πάλι με την ίδια διαδικασία, όπως για την εξίσωση της διάχυσης αλλά θεωρώντας επιπρόσθετα ότι $\phi(x, t) = -D \nabla u(x, t) + vu(x, t)$, δηλαδή ότι έχουμε μία επιπλέον συνεισφορά στη ροή λόγω της μεταφοράς υλικού ίση με $vu(x, t)$, παίρνουμε την εξίσωση μεταφοράς-διάχυσης

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + v \nabla u(x, t) = D \Delta u(x, t) + f(u, x, t).$$

Θα αναφέρουμε ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα στο οποίο προκύπτει η παραπάνω εξίσωση. Θεωρούμε ένα σωλήνα μικρής διατομής μέσα στον οποίο κινείται ένα ρευστό με ταχύτητα v και μέσα στο οποίο διαχέεται μια χημική ουσία όπου

c είναι η συγκέντρωσή της. Τότε μπορούμε να υποθέσουμε ότι έχουμε μεταβολή της c μόνο στη μία διάσταση κατά μήκος του σωλήνα. Η συγκέντρωση c μεταβάλλεται λόγω α) του μηχανισμού της διάχυσης και β) της κίνησης του ρευστού στη μία διάσταση. Επομένως η εξίσωση που μοντελοποιεί το φαινόμενο είναι η

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + v \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) + f(u, x, t).$$

Αρχικές και συνοριακές συνθήκες Για να έχουμε ένα καλά τοποθετημένο πρόβλημα για την εξίσωση της θερμότητας ή και γενικότερα για την εξίσωση της μεταφοράς - διάχυσης χρειαζόμαστε κατάλληλες αρχικές και συνοριακές συνθήκες. Έστω ότι έχουμε τη μονοδιάστατη εξίσωση της θερμότητας

$$\rho c T_t = k T_{xx}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0,$$

η οποία μοντελοποιεί για παράδειγμα τη διάχυση της θερμότητας σε μία ράβδο μήκους l .

Χρειαζόμαστε μια συνθήκη για τη θερμοκρασία της ράβδου τη χρονική στιγμή $t = 0$. Αυτή ονομάζεται αρχική συνθήκη και θα έχει τη μορφή

$$T(x, 0) = f(x), \quad 0 < x < l,$$

όπου $f(x)$ η αρχική κατανομή της θερμοκρασίας. Επίσης χρειαζόμαστε συνθήκες στα άκρα $x = 0$ και $x = l$, δηλαδή συνοριακές συνθήκες. Αν είναι γνωστή η θερμοκρασία στα άκρα της ράβδου τότε οι συνοριακές συνθήκες γράφονται στη μορφή

$$T(0, t) = g(t), \quad T(l, t) = h(t) \quad t > 0,$$

όπου g και h δεδομένες συναρτήσεις. Επίσης είναι δυνατό να έχουμε και άλλου είδους συνοριακές συνθήκες. Αν για παράδειγμα το ένα άκρο της ράβδου για $x = 0$ είναι θερμικά μονωμένο έτσι ώστε να μην μπορεί να διέρχεται θερμότητα από αυτό, από τον νόμο του Fourier έχουμε ότι η θερμική ροή στο $x = 0$ είναι μηδέν ή

$$T_x(0, t) = 0 \quad t > 0.$$

Γενικότερα θα μπορούσαμε να θεωρήσουμε ότι η θερμική ροή σε ένα άκρο, αν αυτή είναι ελεγχόμενη, είναι ίση με μια δεδομένη συνάρτηση, ή ότι

$$k T_x(0, t) = \phi(t), \quad t > 0.$$

Ένας άλλος τύπος συνοριακής συνθήκης, εάν η θερμική ροή στο άκρο της ράβδου εξαρτάται από τη θερμοκρασία του περιβάλλοντος, δίνεται από το νόμο ψύξης του Newton σύμφωνα με τον οποίο

$$k T_x(0, t) = a(T(0, t) - \psi(t)) \quad t > 0.$$

Ο νόμος αυτός εκφράζει το γεγονός ότι η ροή της θερμότητας είναι ανάλογη με τη διαφορά της θερμοκρασίας στο άκρο της ράβδου και της θερμοκρασίας ψ του περιβάλλοντος.

Γενικεύοντας, χαρακτηριστικές μορφές συνοριακών συνθηκών για την εξίσωση της θερμότητας σε ένα χωρίο Ω είναι οι εξής:

$T(x, t) = 0, x \in \partial\Omega$ ή συνθήκες Dirichlet,

$\frac{\partial T}{\partial n}(x, t) = 0, x \in \partial\Omega$ ή συνθήκες Neumann, όπου n το μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο στην $\partial\Omega$,

$\frac{\partial T}{\partial n}(x, t) + bT(x, t) = 0, x \in \partial\Omega$ ή συνθήκες Robin ή μεικτές συνοριακές συνθήκες, όπου b σταθερά.

Τέλος αν έχουμε μια ράβδο πολύ μεγάλου μήκους μπορούμε να θεωρήσουμε ότι έχουμε την εξίσωση της θερμότητας στο διάστημα $-\infty < x < \infty$. Σε αυτή την περίπτωση συνήθως θέτουμε για συνοριακή συνθήκη $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} T(x, t) = 0$ ή ότι η $T(x, t)$ είναι φραγμένη καθώς $x \rightarrow \pm\infty$.

1.3 Παραγωγή της Εξίσωσης Laplace και οι Εξισώσεις του Maxwell

Η εξίσωση Laplace μπορεί να παραχθεί όταν αναζητούμε στάσιμες λύσεις σε παραβολικές ή ελλειπτικές εξισώσεις. Σε αυτή την παράγραφο θα παρουσιάσουμε κάτω από ποιές συνθήκες παίρνουμε την εξίσωση Laplace από την εξίσωση της θερμότητας ή από τις εξισώσεις του Maxwell για τον ηλεκτρομαγνητισμό.

Στάσιμη θερμική ροή Εάν θεωρήσουμε την εξίσωση της θερμότητας

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k\Delta T,$$

σε πολλές περιπτώσεις (όταν οι συνοριακές συνθήκες δεν εξαρτώνται από τον χρόνο) μετά από μεγάλο χρονικό διάστημα η επίδραση της αρχικής συνθήκης εξασθενεί και η θερμοκρασία T εξαρτάται μόνο από τη χωρική μεταβλητή x . Σε αυτή την περίπτωση $\frac{\partial T}{\partial t} = 0$ και παίρνουμε την εξίσωση Laplace.

$$\Delta T = 0.$$

Εάν θεωρήσουμε ότι στην εξίσωση έχουμε μια πηγή ή απαγωγή, η οποία δεν εξαρτάται από το χρόνο, $f = f(x)$, ή αντίστοιχη στάσιμη κατάσταση εκφράζεται από την εξίσωση Poisson

$$\Delta T = f(x).$$

Για την καλή τοποθέτηση του προβλήματος χρειαζόμαστε συνοριακές συνθήκες που είναι της ίδιας μορφής με αυτές για την εξίσωση της θερμότητας.

Εξισώσεις του Maxwell για τον ηλεκτρομαγνητισμό Οι εξισώσεις του Maxwell για τον ηλεκτρομαγνητισμό είναι

$$\begin{aligned}\frac{\partial D}{\partial t} &= \nabla \times H - j, \\ \frac{\partial B}{\partial t} &= -\nabla \times E, \\ \nabla \cdot D &= \rho, \\ \nabla \cdot B &= 0, \\ D &= \epsilon E, \\ B &= \mu H, \\ j &= \sigma E,\end{aligned}$$

όπου B είναι η μαγνητική επαγωγή, E το ηλεκτρικό πεδίο, D είναι η ηλεκτρική μετατόπιση, H είναι η ένταση του μαγνητικού πεδίου, ϵ είναι η επιδεκτικότητα, μ είναι η διαπερατότητα, j είναι η αγωγιμότητα, ρ είναι η πυκνότητα φορτίου και σ ο συντελεστής ηλεκτρικής αγωγιμότητας.

Αυτό το σύστημα εξισώσεων μπορεί να απλοποιηθεί εάν θέσουμε $\epsilon = \epsilon_0$ (σταθερά) και $\mu = \mu_0$ (σταθερά) και μελετήσουμε τη στάσιμη λύση.

Θεωρώντας τη στάσιμη κατάσταση του συστήματος έχουμε $\frac{\partial B}{\partial t} = 0$ και συνεπώς $\nabla \times E = 0$. Επομένως για το ηλεκτρικό πεδίο E έχουμε $E = -\nabla\phi$, με ϕ το ηλεκτρικό δυναμικό. Τότε $-\nabla(\epsilon_0\nabla\phi) = -\epsilon_0\Delta\phi = \rho$. Εάν θέσουμε $\rho = 0$ τότε παίρνουμε την εξίσωση Laplace για το ηλεκτρικό δυναμικό ϕ .

$$\Delta\phi = 0.$$

Όμοια εάν $j = 0$ τότε $\nabla \times H = 0$ άρα $H = \nabla\psi$, με ψ το δυναμικό. Τελικά έχουμε $\Delta\psi = 0$ για μ σταθερό και $\nabla \cdot B = 0$.

1.4 Μέθοδοι Διαταραχών

Πολλές φορές οι εξισώσεις ενός μαθηματικού μοντέλου δεν είναι δυνατόν να λυθούν ακριβώς με αναλυτικές μεθόδους. Σε αυτή την περίπτωση προσπαθούμε να βρούμε μια προσεγγιστική αναλυτική λύση ή και χρησιμοποιούμε αριθμητικές μεθόδους. Οι μέθοδοι διαταραχών βασίζονται στο γεγονός ότι μετά από κατάλληλη κανονικοποίηση πιθανόν να προκύπτουν στην εξίσωση μικροί όροι τους οποίους μπορούμε να απαλείψουμε. Πιο συγκεκριμένα αναζητούμε μια προσεγγιστική λύση στο πρόβλημα που αποτελείται από κάποιους όρους ενός αναπτύγματος της μορφής Taylor ως προς μια παράμετρο του προβλήματος η οποία είναι μικρή.

1.4.1 Κανονική Διαταραχή

Θα παρουσιάσουμε τις γενικές αρχές των μεθόδων διαταραχών χρησιμοποιώντας για παράδειγμα συνήθεις διαφορικές εξισώσεις δεύτερης τάξης.

Θεωρούμε μια διαφορική εξίσωση 2ης τάξης

$$F(t, y, \dot{y}, \ddot{y}, \epsilon) = 0, \quad t \in I \subseteq \mathbb{R}, \quad (1.14)$$

όπου ϵ είναι μια μικρή παράμετρος (σε σχέση με τη μονάδα), δηλαδή $\epsilon \ll 1$. Εάν στο πρόβλημα μετά από κατάλληλη κανονικοποίηση προκύψει κάποια μεγάλη παράμετρος π.χ. λ , $\lambda \gg 1$ τότε θέτουμε $\epsilon = \frac{1}{\lambda} \ll 1$. Σε αυτό το πρόβλημα προκειμένου να βρούμε μια αναλυτική προσεγγιστική λύση θεωρούμε ότι η λύση έχει τη μορφή μιας σειράς διαταραχής, δηλαδή ότι

$$y(t) \simeq y_0(t) + \epsilon y_1(t) + \epsilon^2 y_2(t) + \dots \quad (1.15)$$

Η μέθοδος των κανονικών διαταραχών βασίζεται στην υπόθεση ότι η λύση της (1.14) είναι της μορφής (1.15). Αντικαθιστούμε την (1.15) στην (1.14) και προκύπτει μια σειρά προβλημάτων για τα y_0, y_1, y_2 κ.τ.λ. από τα οποία προσδιορίζουμε αυτές τις συναρτήσεις. Η μέθοδος είναι επιτυχής όταν η προσέγγιση συγκλίνει στο μηδέν ομοιόμορφα στο διάστημα I καθώς $\epsilon \rightarrow 0$ με κάποια καλώς ορισμένη ταχύτητα. Ο όρος y_0 λέγεται πρωτεύουσα τάξης όρος ή πρωτεύων όρος. Οι όροι y_0, y_1, y_2 θεωρούνται διορθωτικοί όροι υψηλότερης τάξης. Αν η μέθοδος είναι επιτυχής η y_0 είναι λύση του προβλήματος

$$F(t, y, \dot{y}, \ddot{y}, 0) = 0, \quad t \in I,$$

το οποίο ονομάζεται μη διαταραγμένο πρόβλημα, ενώ το πρόβλημα (1.14) ονομάζεται διαταραγμένο.

Παράδειγμα Θεωρούμε ένα σώμα μάζας m το οποίο κινείται με αρχική ταχύτητα V_0 κατά μήκος μιας ευθείας σε μέσο (όπως για παράδειγμα ένα ρευστό) που του ασκεί δύναμη αντίστασης f η οποία εξαρτάται από την ταχύτητα του σώματος με μη γραμμικό τρόπο. Έχουμε $v = v(t)$, $f(v) = av - bv^2$ με a, b σταθερές και υποθέτουμε ότι $a \gg b$. Έχουμε ότι $[a] = \frac{M}{T}$, $[b] = \frac{M}{L}$. Από το νόμο του Newton η εξίσωση που μοντελοποιεί τη κίνηση του σώματος είναι

$$m \frac{dv}{dt} = -av + bv^2, \quad v(0) = V_0,$$

Κανονικοποιούμε παίρνοντας για χαρακτηριστική ταχύτητα την αρχική ταχύτητα V_0 και θέτουμε $y = \frac{v}{V_0}$ όπου y η αδιάστατη ταχύτητα ενώ για το χαρακτηριστικό χρόνο παίρνουμε $t_0 = \frac{m}{a}$ και θέτουμε $\tau = \frac{t}{m/a}$ όπου τ ο αδιάστατος χρόνος. Η εξίσωση γίνεται

$$m \frac{dy}{d\tau} = -y + \epsilon y^2, \quad y(0) = 1, \quad (1.16)$$

όπου $\epsilon = \frac{bV_0}{a} \ll 1$.

Η εξίσωση (1.16) είναι η διαταραγμένη μορφή της εξίσωσης

$$m \frac{dy}{d\tau} = -y, \quad y(0) = 1.$$

Για να βρούμε μια προσεγγιστική λύση για την (1.16) θέτουμε

$$y(\tau) = y_0(\tau) + \epsilon y_1(\tau) + \epsilon^2 y_2(\tau) + \dots,$$

αντικαθιστούμε στην εξίσωση (1.16) και παίρνουμε

$$\begin{aligned} \dot{y}_0(\tau) + \epsilon \dot{y}_1(\tau) + \epsilon^2 \dot{y}_2(\tau) + \dots = & - (y_0(\tau) + \epsilon y_1(\tau) + \epsilon^2 y_2(\tau) + \dots) \\ & + \epsilon (y_0(\tau) + \epsilon y_1(\tau) + \epsilon^2 y_2(\tau) + \dots)^2, \end{aligned}$$

ενώ για την αρχική συνθήκη έχουμε $y_0(0) + \epsilon y_1(0) + \epsilon^2 y_2(0) + \dots = 1$, άρα

$$\begin{aligned} \dot{y}_0(\tau) &= -y_0, & y_0(0) &= 1, \\ \dot{y}_1(\tau) &= -y_1 + y_0^2, & y_1(0) &= 0, \\ \dot{y}_2(\tau) &= -y_2 + 2y_0 y_1, & y_2(0) &= 0, \\ &\dots & & \end{aligned}$$

Λύνοντας παίρνουμε

$$\begin{aligned} y_0(\tau) &= e^{-\tau}, \\ y_1(\tau) &= e^{-\tau} - e^{-2\tau}, \\ y_2(\tau) &= e^{-\tau} - e^{-2\tau} + e^{-3\tau}, \end{aligned}$$

Επομένως η προσεγγιστική λύση έχει τη μορφή

$$y(\tau) \simeq y_a = e^{-\tau} + \epsilon(e^{-\tau} - e^{-2\tau}) + \epsilon^2(e^{-\tau} - e^{-2\tau} + e^{-3\tau}),$$

Στη συγκεκριμένη περίπτωση η εξίσωση (1.16) είναι εξίσωση Bernoulli και μπορεί να λυθεί αναλυτικά. Η ακριβής λύση είναι

$$y(\tau) = \frac{e^{-\tau}}{1 + \epsilon(e^{-\tau} - 1)}.$$

Αναπτύσσοντας σε σειρά για $\epsilon \ll 1$ παίρνουμε

$$y(\tau) = e^{-\tau} + \epsilon(e^{-\tau} - e^{-2\tau}) + \epsilon^2(e^{-\tau} - e^{-2\tau} + e^{-3\tau}) + \dots,$$

και το σφάλμα της προσέγγισης είναι

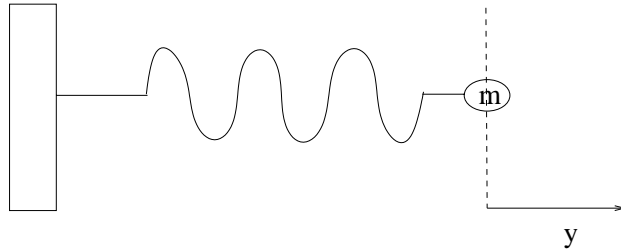
$$y(\tau) - y_a(\tau) = m_1(\tau)\epsilon^3 + m_2(\tau)\epsilon^4 + \dots,$$

όπου οι συναρτήσεις m_i είναι φραγμένες. Θεωρώντας το τ σταθερό έχουμε $y(\tau) - y_a(\tau) \rightarrow 0$ για $\epsilon \rightarrow 0$ και επομένως η προσέγγιση είναι ικανοποιητική. Επιπλέον μπορεί να δειχθεί ότι η σύγκλιση είναι ομοιόμορφη για $\tau > 0$ και $\epsilon \rightarrow 0$.

Εξίσωση Duffing - Μη γραμμικός ταλαντωτής

Πολλές φορές χρησιμοποιώντας ένα κανονικό ανάπτυγμα διαταραχών παίρνουμε μια προσεγγιστική λύση που όμως δεν ισχύει ομοιόμορφα σε κάθε χρονικό διάστημα. Αυτό για παράδειγμα συμβαίνει αν θεωρήσουμε την εξίσωση Duffing για ένα μη γραμμικό ταλαντωτή.

Θεωρούμε ένα σύστημα μάζας ελατηρίου. Το ελατήριο έχει δύναμη επαναφοράς $F_c = ky + ay^2$ όπου k και a είναι σταθερές και $y = y(t)$ η απομάκρυνση από το σημείο ισορροπίας.



Σχήμα 1.4: Σύστημα μάζας ελατηρίου.

Υποθέτουμε ότι $a \ll k$. Από το δεύτερο νόμο του Newton έχουμε ότι η εξίσωση που μοντελοποιεί την κίνηση του ταλαντωτή είναι

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} = -ky - ay^3, \quad t > 0.$$

Για αρχικές συνθήκες παίρνουμε $y(0) = A$ και $\frac{dy}{dt}(0) = 0$, δηλαδή έχουμε μια αρχική απομάκρυνση A και μηδενική αρχική ταχύτητα. Λόγω του όρου “ $-ay^3$ ” το πρόβλημα είναι μη γραμμικό και δεν μπορούμε να έχουμε αναλυτική λύση. Έχουμε $[k] = \frac{M}{T^2}$, $[a] = \frac{M}{L^2 T^2}$, $[m] = M$, $[A] = L$. Κανονικοποιούμε θέτοντας $t_0 = \sqrt{\frac{m}{k}}$, και $\tau = \frac{t}{t_0}$ όπου τ ο αδιάστατος χρόνος. Δηλαδή κανονικοποιούμε με το χρόνο που σχετίζεται με τη συχνότητα του αντίστοιχου γραμμικού ταλαντωτή ($a = 0$). Επίσης θέτουμε $u = \frac{y}{A}$ όπου u η αδιάστατη απομάκρυνση. Τότε η εξίσωση γίνεται

$$\begin{aligned} \ddot{u} + u + \epsilon u^3 &= 0, & \tau > 0, \\ u(0) &= 1, & \dot{u}(0) = 0, \end{aligned} \tag{1.17}$$

με $\epsilon = \frac{aA^2}{k} \ll 1$. Αυτή είναι η εξίσωση Duffing.

Παίρνουμε ένα ασυμπτωτικό ανάπτυγμα διαταραχής

$$u(\tau) = u_0(\tau) + \epsilon u_1(\tau) + \epsilon^2 u_2(\tau) + \dots,$$

και αντικαθιστώντας στην εξίσωση (1.17) προκύπτει η παρακάτω ακολουθία προβλημάτων

$$\begin{aligned} \ddot{u}_0 + u_0 &= 0, & u_0(0) &= 1, & \dot{u}_0(0) &= 0 \\ \ddot{u}_1 + u_1 &= -u_0^3, & u_1(0) &= 0, & \dot{u}_1(0) &= 0, \\ &\dots \end{aligned} \quad (1.18)$$

Λύνοντας παίρνουμε $u_0(\tau) = \cos(\tau)$ και η εξίσωση (1.18) γίνεται

$$\ddot{u}_1 + u_1 = -\cos^3(\tau), \quad u_1(0) = 0, \quad \dot{u}_1(0) = 0,$$

Χρησιμοποιώντας την ταυτότητα $\cos(3\tau) = 4\cos^3(\tau) - 3\cos(\tau)$ έχουμε

$$\ddot{u}_1 + u_1 = -\frac{1}{4}(3\cos(\tau) + \cos(3\tau)),$$

Η λύση της ομογενούς εξίσωσης είναι $u_1^h = c_1 \cos(\tau) + c_2 \sin(\tau)$, για c_1, c_2 σταθερές. Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο προσδιοριστέων συντελεστών για να βρούμε μια μερική λύση του προβλήματος θέτουμε $u_1^p = C \cos(3\tau) + D\tau \cos(\tau) + E\tau \sin(\tau)$ για C, D, E προσδιοριστέες σταθερές. Βρίσκουμε ότι $C = \frac{1}{3}$, $D = 0$, $E = -\frac{3}{8}$, άρα τελικά η u_1 έχει τη μορφή

$$u_1 = c_1 \cos(\tau) + c_2 \sin(\tau) + \frac{1}{32} \cos(3\tau) - \frac{3}{8} \tau \cos(\tau).$$

Χρησιμοποιώντας τις αρχικές συνθήκες παίρνουμε

$$u_1 = -\frac{1}{32} \cos(\tau) + \frac{1}{32} \cos(3\tau) - \frac{3}{8} \tau \cos(\tau).$$

Άρα τελικά η προσεγγιστική λύση του προβλήματος είναι

$$u \simeq \cos(\tau) + \epsilon \left(-\frac{1}{32} \cos(\tau) + \frac{1}{32} \cos(3\tau) - \frac{3}{8} \tau \cos(\tau) \right).$$

Βλέπουμε ότι ο όρος $\epsilon \tau \sin(\tau)$ δεν είναι κατ' ανάγκη μικρός για όλους τους χρόνους. Για τ σταθερό έχουμε $\epsilon \tau \sin(\tau) \rightarrow 0$ για $\epsilon \rightarrow 0$. Όμως εάν η μεταβλητή τ είναι της τάξης του $\frac{1}{\epsilon}$ ο όρος $\epsilon \tau \sin(\tau)$ είναι μεγάλος και το ανάπτυγμα αποτυγχάνει. Τέτοιοι όροι ονομάζονται αιώνιοι (secular terms). Άρα η προσέγγιση που βρήκαμε ισχύει μόνο σε διάστημα $[0, T]$, όπου $\epsilon \ll \frac{8}{3T}$. Για να βρούμε ένα ανάπτυγμα που να προσεγγίζει ομοιόμορφα τη λύση του προβλήματος για κάθε χρόνο χρειάζεται μια διαφορετική μέθοδος διαταραχών τέτοια ώστε να απαλείφονται οι αιώνιοι όροι.

1.4.2 Μέθοδος Πολλαπλών Κλιμάκων

Αυτή η μέθοδος βασίζεται στο γεγονός ότι πολλά προβλήματα περιλαμβάνουν δύο ή και περισσότερες κλίμακες χρόνου. Στην προκειμένη περίπτωση για την εξίσωση Duffing βλέπουμε ότι η προσεγγιστική λύση της u δεν εξαρτάται μόνο από το τ αλλά και από το $\epsilon\tau$. Θεωρούμε ότι η λύση u είναι συνάρτηση δύο μεταβλητών: του τ και του $\sigma = \epsilon\tau$ δηλαδή $u(\tau) = u(\tau, \sigma)$. Γράφοντας το u συναρτήσει αυτών των δύο μεταβλητών έχουμε

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial\tau} + \epsilon \frac{\partial}{\partial\sigma} + \dots$$

ενώ

$$\frac{d^2}{dt^2} = \frac{\partial^2}{\partial\tau^2} + 2\epsilon \frac{\partial^2}{\partial\tau\partial\sigma} + \epsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial\sigma^2} + \dots$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση Duffing παίρνουμε

$$\frac{\partial^2 u}{\partial\tau^2} + 2\epsilon \frac{\partial^2 u}{\partial\tau\partial\sigma} + \epsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial\sigma^2} + \dots + u + \epsilon u^3 = 0. \quad (1.19)$$

Θεωρούμε ένα ασυμπτωτικό ανάπτυγμα για τη u ως προς ϵ

$$u = u_0(\tau, \sigma) + \epsilon u_1(\tau, \sigma) + \epsilon^2 u_2(\tau, \sigma) + \dots$$

και αντικαθιστούμε στην εξίσωση (1.19). Άρα

$$\frac{\partial^2 u_0}{\partial\tau^2} + \epsilon \frac{\partial^2 u_1}{\partial\tau^2} + 2\epsilon \frac{\partial^2 u_0}{\partial\tau\partial\sigma} + u_0 + \epsilon u_1 + \epsilon u_0^2 + \dots = 0.$$

Εξισώνοντας τους όρους ίδιας τάξης ως προς ϵ έχουμε για τον πρωτεύοντα όρο u_0

$$\frac{\partial^2 u_0}{\partial\tau^2} + u_0 = 0. \quad (1.20)$$

Για τους όρους τάξης ϵ παίρνουμε

$$\frac{\partial^2 u_1}{\partial\tau^2} + u_1 = -2 \frac{\partial^2 u_0}{\partial\tau\partial\sigma} - u_0^3. \quad (1.21)$$

Η εξίσωση (1.20) έχει γενική λύση $u_0 = a(\sigma) \cos(\tau + b(\sigma))$, όπου οι συναρτήσεις $a(\sigma)$, $b(\sigma)$ θα προσδιοριστούν έτσι, ώστε να απαλείψουμε τους αιώνιους όρους. Αντικαθιστούμε την λύση για την u_0 στην εξίσωση (1.21) και έχουμε

$$\frac{\partial^2 u_1}{\partial\tau^2} + u_1 = -2 \frac{\partial^2}{\partial\tau\partial\sigma} [a \cos(\tau + b)] - a^3 \cos^3(\tau + b),$$

ή

$$\frac{\partial^2 u_1}{\partial\tau^2} + u_1 = 2 \frac{\partial a}{\partial\tau} \sin(\tau + b) + (2a \frac{\partial b}{\partial\sigma} - \frac{3}{4} a^3) \cos(\tau + b) - \frac{1}{4} a^3 \cos(3\tau + 3b). \quad (1.22)$$

Στο δεύτερο μέλος της εξίσωσης (1.22) έχουμε τους μη ομογενείς όρους $\sin(\tau+b)$, $\cos(\tau+b)$ οι οποίοι στην ειδική λύση της εξίσωσης (1.22) θα μας δώσουν όρους της μορφής $\tau \cos(\tau+b)$ και $\tau \sin(\tau+b)$, δηλαδή αιώνιους όρους, άρα πρέπει να επιλέξουμε τις συναρτήσεις a , b έτσι ώστε να μηδενιστούν οι συντελεστές των $\sin(\tau+b)$ και $\cos(\tau+b)$. Επομένως πρέπει να έχουμε

$$\frac{\partial a}{\partial \sigma}(\sigma) = 0, \quad (1.23)$$

και

$$2a \frac{\partial b}{\partial \sigma}(\sigma) - \frac{3}{4}a^3 = 0. \quad (1.24)$$

Από τις εξισώσεις (1.23), και (1.24) έχουμε $a = \text{σταθερά}$ ή $a = a(0) = a_0$, ενώ $b = \frac{3}{8}a_0^2\sigma + b(0)$.

Επομένως παίρνουμε

$$u \simeq a_0 \cos\left(\tau + \frac{3}{8}\sigma a_0^2 + b_0\right) + \frac{1}{32}\epsilon a_0^2 \cos\left(3\tau + \frac{9}{8}\sigma a_0^2 + 3b_0\right) + \dots$$

ή για $\sigma = \epsilon\tau$

$$u \simeq a_0 \cos\left(\tau + \frac{3}{8}\epsilon\tau a_0^2 + b_0\right) + \frac{1}{32}\epsilon a_0^2 \cos\left(3\tau + \frac{9}{8}a_0^2\epsilon\tau + 3b_0\right) + \dots$$

Τέλος από τις αρχικές συνθήκες προσδιορίζουμε τις σταθερές $a_0, b_0, a_0 = 1, b_0 = 0$, και παίρνουμε

$$u \simeq \cos\left(\tau + \frac{3}{8}\epsilon\tau\right) + \frac{1}{32}\epsilon \left(\cos\left(3\tau + \frac{9}{8}\epsilon\tau\right) \right).$$

Βλέπουμε ότι ο διορθωτικός όρος είναι φραγμένος και το ανάπτυγμα ισχύει για κάθε χρόνο.

1.5 Στοιχεία Ασυμπτωτικής Ανάλυσης

Για μια ασυμπτωτική λύση διαφορικής εξίσωσης το ιδανικό θα ήταν να έχουμε ένα πεπερασμένο άθροισμα όρων της σειράς διαταραχών το οποίο δεδομένης μιας μικρής παραμέτρου ϵ μας δίνει μια προσεγγιστική λύση για όλο το εύρος των τιμών της ανεξάρτητης μεταβλητής. Προκειμένου να είμαστε σε θέση να προσδιορίσουμε το κατά πόσο καλή προσέγγιση της ακριβούς λύσης μας δίνει ένα ανάπτυγμα διαταραχής χρειαζόμαστε τις παρακάτω βασικές έννοιες της ασυμπτωτικής ανάλυσης.

Ορισμός Έστω $f(\epsilon), g(\epsilon)$ συναρτήσεις ορισμένες σε περιοχή του $\epsilon = 0$ η οποία δεν περιέχει απαραίτητα το $\epsilon = 0$ γράφουμε $f(\epsilon) = o(g(\epsilon))$ για $\epsilon \rightarrow 0$ αν

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left| \frac{f(\epsilon)}{g(\epsilon)} \right| = 0.$$

Επίσης $f(\epsilon) = O(g(\epsilon))$ για $\epsilon \rightarrow 0$ αν υπάρχει $M > 0$ τέτοιο ώστε

$$|f(\epsilon)| \leq M|g(\epsilon)|,$$

για κάθε $\epsilon > 0$.

Αν ισχύει $f(\epsilon) = o(g(\epsilon))$ λέμε ότι η f είναι τάξης όμικρον μικρό της g για $\epsilon \rightarrow 0$. Αν ισχύει $f(\epsilon) = O(g(\epsilon))$ τότε λέμε ότι η f είναι τάξης όμικρον κεφαλαίο της g για $\epsilon \rightarrow 0$. Συνηθισμένες συναρτήσεις σύγκρισης (στη θέση της g) είναι οι ϵ^n , $\epsilon^n \ln^m(\epsilon)$, $m, n \in \mathbb{N}$. Για παράδειγμα αν $f(\epsilon) = O(1)$ τότε η f είναι η φραγμένη κοντά στο $\epsilon = 0$. Αν $f(\epsilon) = O(1)$ τότε η $f \rightarrow 0$ για $\epsilon \rightarrow 0$. Επίσης αν $f(\epsilon) = o(g(\epsilon))$ τότε η $f \rightarrow 0$ ταχύτερα από την g .

Για παράδειγμα $\epsilon^2 \ln(\epsilon) = o(\epsilon)$ για $\epsilon \rightarrow \epsilon^0+$. Πράγματι έχουμε

$$\lim_{\epsilon \rightarrow \epsilon^0+} \frac{\epsilon^2 \ln(\epsilon)}{\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow \epsilon^0+} \frac{\ln(\epsilon)}{1/\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow \epsilon^0+} \frac{1/\epsilon}{-1/\epsilon^2} = 0.$$

Επίσης $\sin(\epsilon) = O(\epsilon)$ για $\epsilon \rightarrow \epsilon^0+$ επειδή $\frac{\sin(\epsilon)}{\epsilon} \rightarrow 1$ για $\epsilon \rightarrow 0$.

Λέμε ότι $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} h(t, \epsilon) = 0$ ομοιόμορφα στο διάστημα I , $t \in I$ σε περιοχή του $\epsilon = 0$, η οποία δεν περιέχει απαραίτητα το $\epsilon = 0$, αν η σύγκλιση γίνεται με τον ίδιο ρυθμό για κάθε $t \in I$, δηλαδή $\forall \eta > 0, \exists \epsilon_0$ ανεξάρτητο του t έτσι ώστε για $|\epsilon| < \epsilon_0$ έχουμε $|\eta(t, \epsilon)| < \eta, \forall t \in I$.

Αν απλώς $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} h(t_0, \epsilon) = 0, \forall t_0 \in I$ τότε η σύγκλιση είναι σημειακή.

Για να ελέγξουμε αν $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} h(t, \epsilon) = 0$ ομοιόμορφα στο διάστημα I αρκεί να βρούμε μια συνάρτηση $H = H(\epsilon)$ με $|h(t, \epsilon)| \leq H(\epsilon), \forall t \in I$ και με $H(\epsilon) \rightarrow 0$ για $\epsilon \rightarrow 0$.

Ορισμός Έστω ότι οι $f(t, \epsilon), g(t, \epsilon)$ είναι συναρτήσεις ορισμένες $\forall t \in I$ και για κάθε ϵ σε περιοχή του μηδενός. Λέμε ότι $f(t, \epsilon) = o(g(t, \epsilon))$, για $\epsilon \rightarrow 0$ αν

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left| \frac{f(t, \epsilon)}{g(t, \epsilon)} \right| = 0,$$

κατά σημείο στο I . Αν έχουμε ομοιόμορφη σύγκλιση στο I γράφουμε $f(t, \epsilon) = o(g(t, \epsilon))$ για $\epsilon \rightarrow 0$ ομοιόμορφα στο I .

Αν υπάρχει $M = M(t)$ στο I με $|f(t, \epsilon)| \leq M(t)|g(t, \epsilon)|$ τότε $f(t, \epsilon) = O(g(t, \epsilon))$, για $\epsilon \rightarrow 0$ κατά σημείο, ενώ αν η $M(t)$ είναι φραγμένη στο I , τότε λέμε ότι $f(t, \epsilon) = O(g(t, \epsilon))$ ομοιόμορφα στο I .

Ορισμός Η $y_a(t, \epsilon)$ είναι ομοιόμορφα ασυμπτωτική προσέγγιση μιας συνάρτησης $y(t, \epsilon)$ στο I για $\epsilon \rightarrow 0$, αν το σφάλμα $y(t, \epsilon) - y_a(t, \epsilon) \rightarrow 0, \epsilon \rightarrow 0$ ομοιόμορφα για $t \in I$.

Παράδειγμα Έστω $y(t, \epsilon) = e^{-t\epsilon}, t > 0, \epsilon \ll 1$. Τότε $y_a(t, \epsilon) = 1 - t\epsilon + \frac{1}{2}t^2\epsilon^2$ και $E(t, \epsilon) = e^{-t\epsilon} - 1 + t\epsilon - \frac{1}{2}t^2\epsilon^2 = -\frac{1}{3}t^3\epsilon^3 + \dots$. Άρα $E(t, \epsilon) = o(\epsilon^2)$, για $\epsilon \rightarrow 0$, και δεδομένο $t, t > 0$. Για $t \gg 1$ έχουμε $E(t, \epsilon) \gg 1$ άρα η προσέγγιση δεν είναι ομοιόμορφη για κάθε $t > 0$.

Για μια διαφορική εξίσωση, όπως για παράδειγμα για μια δεύτερης τάξης συνήθη διαφορική εξίσωση, $F(t, y, \dot{y}, \ddot{y}, \epsilon) = 0$, $t \in I$ σπάνια γνωρίζουμε την ακριβή λύση της y . Τότε λέμε ότι μια προσεγγιστική λύση $y_a(t, \epsilon)$ ικανοποιεί την εξίσωση ομοιόμορφα για $t \in I$ και $\epsilon \rightarrow 0$ αν

$$r(t, \epsilon) = F(t, y_a(t, \epsilon), \dot{y}_a(t, \epsilon), \ddot{y}_a(t, \epsilon)) \rightarrow 0$$

ομοιόμορφα στο I για $\epsilon > 0$.

Για παράδειγμα στο πρόβλημα αρχικών τιμών

$$\ddot{y} + \dot{y}^2 + \epsilon y = 0, \quad t > 0, \quad 0 < \epsilon \ll 1, \quad y(0) = 0, \quad \dot{y}(0) = 1,$$

και για $y = y_0 + \epsilon y_1 + \dots$ παίρνουμε $y_0 = \ln(t+1)$ και $r(t, \epsilon) = \ddot{y}_0 + \dot{y}_0^2 + \epsilon y_0 = \epsilon \ln(t+1)$. Τότε $r(t, \epsilon) = O(\epsilon)$ για $\epsilon \rightarrow 0$ αλλά όχι ομοιόμορφα για $t > 0$. Για $t \in [0, T]$ έχουμε $|\epsilon \ln(t+1)| \leq \epsilon \ln(T+1)$ και $r(t, \epsilon) = O(\epsilon)$ για $\epsilon \rightarrow 0$ ομοιόμορφα για $t \in [0, T]$.

Γενικά το ανάπτυγμα $y(t) = y_0(t) + \epsilon y_1(t) + \dots$ λέγεται ασυμπτωτική δυναμοσειρά.

Η ακολουθία $\{g_n(t, \epsilon)\}$ είναι μια ασυμπτωτική ακολουθία για $\epsilon \rightarrow 0$, $t \in I$, εάν $g_{n+1}(t, \epsilon) = o(g_n(t, \epsilon))$, $\epsilon \rightarrow 0$, $n \in \mathbb{N}$.

Για μια συνάρτηση $y(t, \epsilon)$ και μια ακολουθία $\{g_n(t, \epsilon)\}$ με $\epsilon \rightarrow 0$, η όχι αναγκαία συγκλίνουσα σειρά $\sum_{n=0}^{\infty} a_n g_n(t, \epsilon)$ όπου a_n σταθερές, λέγεται ασυμπτωτικό ανάπτυγμα της $y(t, \epsilon)$, για $\epsilon \rightarrow 0$ εάν $y(t, \epsilon) - \sum_{n=0}^N a_n g_n(t, \epsilon) = o(g_N(t, \epsilon))$, για κάθε N .

Εάν τα όρια είναι ομοιόμορφα τότε λέμε ότι έχουμε ομοιόμορφο ασυμπτωτική ακολουθία και ομοιόμορφο ασυμπτωτικό ανάπτυγμα. Συνήθως τέτοια αναπτύγματα που προκύπτουν από τη διαδικασία επίλυσης διαφορικών εξισώσεων έχουν όρους της μορφής $g_n(t, \epsilon) = y_n(t)\phi_n(t)$.

1.6 Θεωρία Οριακού Στρώματος

Όπως ήδη είδαμε σε πολλά προβλήματα η μέθοδος των κανονικών διαταραχών αποτυγχάνει. Εάν για παράδειγμα η μικρή παράμετρος πολλαπλασιάζει τη μεγιστοβάθμια παράγωγο της εξίσωσης, η πρώτη προσέγγιση με κανονικό ανάπτυγμα διαταραχών θα μας δώσει μια εξίσωση με τάξη μικρότερη από την αρχική και 'χάνουμε' ένα βασικό χαρακτηριστικό του προβλήματος. Σε αυτή την περίπτωση χρειαζόμαστε τη θεωρία οριακού στρώματος για να βρούμε ένα ομοιόμορφο ασυμπτωτικό ανάπτυγμα της λύσης.

Πιο συγκεκριμένα θεωρούμε το πρόβλημα αρχικών τιμών

$$\begin{aligned} \epsilon y'' + (1 + \epsilon)y' + y &= 0, \quad 0 < t < 1, \quad 0 < \epsilon \ll 1 & (1.25) \\ y(0) &= 1, \quad y(1) = 1. \end{aligned}$$

Έστω $y(t) = y_0(t) + \epsilon y_1(t) + \dots$. Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (1.25) παίρνουμε $\epsilon(y_0''(t) + \epsilon y_1''(t) + \dots) + (1 + \epsilon)(y_0'(t) + \epsilon y_1'(t) + \dots) + y_0(t) + \epsilon y_1(t) + \dots = 0$, $y_0(0) + \epsilon y_1(0) + \dots = 1$, $y_0(1) + \epsilon y_1(1) + \dots = 1$.

Άρα για τον πρωτεύοντα όρο και τον πρώτο όρο διόρθωσης έχουμε

$$\begin{aligned} y_0'' + y_0 &= 0, & y_0(0) &= 0, & y_0(1) &= 1, \\ y_1'' + y_1 &= -y_0'' - y_0', & y_1(0) &= 0, & y_1(1) &= 0. \end{aligned}$$

Βλέπουμε ότι $y_0 = ce^{-t}$, για c σταθερά ενώ έχουμε δύο συνοριακές συνθήκες $y_0(0) = 0, y_0(1) = 1$, πράγμα που σημαίνει ότι το κανονικό ανάπτυγμα διαταραχών δεν μπορεί να μας δώσει ικανοποιητική απάντηση σε αυτή την περίπτωση.

Ο λόγος για τον οποίο έχουμε αυτή την ιδιομορφία είναι ότι η y'' δεν είναι παντού τάξης ένα στο $[0, 1]$ και άρα ο όρος $\epsilon y''$ δεν είναι πάντα αμελητέος. Πράγματι επειδή το πρόβλημα είναι γραμμικό μπορούμε να βρούμε την αναλυτική λύση του προβλήματος, η οποία είναι

$$y = \frac{1}{e^{-1} - e^{-1/\epsilon}} [e^{-t} - e^{-t/\epsilon}].$$

Η λύση μεταβάλλεται απότομα κοντά στο $t = 0$ και για παράδειγμα $y''(\epsilon) = O(\epsilon^{-2})$ ενώ $\epsilon y''(\epsilon) = O(1/\epsilon)$ το οποίο είναι μη αμελητέο. Αντίθετα για μεγαλύτερες τιμές του t , π.χ. $t = \frac{1}{2}$ έχουμε $\epsilon y''(\frac{1}{2}) = O(\epsilon)$. Επομένως η εξίσωση (1.26) μας δίνει μια καλή προσέγγιση για την περιοχή μακριά από το μηδέν και αυτή ονομάζεται εξωτερικό χωρίο, ενώ, όταν είμαστε κοντά στο μηδέν, δηλαδή για $t = O(\epsilon)$ ή μικρότερο, η y μεταβάλλεται πολύ γρήγορα και αυτή η περιοχή ονομάζεται οριακό στρώμα.

Για την εξωτερική περιοχή από την εξίσωση (1.26) και τη συνθήκη $y_0(1) = 1$ έχουμε $y_0 = e^{1-t}$. Αυτή ονομάζεται εξωτερική λύση του προβλήματος. Για την εσωτερική λύση πρέπει να εφαρμόσουμε τέτοια κανονικοποίηση ώστε ο συντελεστής της y'' να γίνει μονάδα. Θέτουμε $\tau = \frac{t}{\epsilon}$, $Y = y$ και παίρνουμε

$$Y''(\tau) + (1 + \epsilon)Y'(\tau) + \epsilon Y(\tau) = 0,$$

ή για τους όρους πρώτης τάξης

$$Y''(\tau) + Y'(\tau) = 0,$$

και από την αρχική συνθήκη στο $t = \tau = 0$ έχουμε $Y(\tau) = C(1 - e^{-\tau})$, για C σταθερά η οποία θα προσδιοριστεί. Η $Y(\tau)$ είναι η λεγόμενη εσωτερική λύση του προβλήματος.

Προκειμένου να πάρουμε ένα ομοιόμορφο ασυμπτωτικό ανάπτυγμα για όλο το διάστημα $[0, 1]$ πρέπει να προσδιορίσουμε τη σταθερά C στην εσωτερική λύση. Για αυτό απαιτούμε για την εξωτερική λύση, όταν $t \rightarrow 0$ και για την εσωτερική όταν $\tau \rightarrow \infty$, να συγκλίνουν στο ίδιο σημείο και άρα

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} Y(\tau) = \lim_{t \rightarrow 0} y_0(t)$$

ή

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} [C(1 - e^{-\tau})] = \lim_{t \rightarrow 0} e^{1-t} = e,$$

άρα $C = e$ και η εσωτερική λύση έχει τη μορφή $Y(\tau) = e(1 - e^{-\tau})$.

Το άθροισμα της εξωτερικής και εσωτερικής προσέγγισης ως προς την ίδια ανεξάρτητη μεταβλητή, $Y(\frac{t}{\epsilon}) + y_0(t)$, μας δίνει μια προσέγγιση η οποία κοντά στο $t = 0$ είναι $Y(\frac{t}{\epsilon}) + y_0(t) \simeq Y(\frac{t}{\epsilon})$ ενώ μακριά από το $t = 0$ είναι $Y(\frac{t}{\epsilon}) + y_0(t) \simeq y_0(t)$ και σε μια ενδιάμεση περιοχή π.χ. για $t = O(\sqrt{\epsilon})$, γίνεται $Y(\frac{t}{\epsilon}) + y_0(t) \simeq 2C$. Άρα για να πάρουμε ένα ομοιόμορφο ασυμπτωτικό ανάπτυγμα θέλουμε την εσωτερική λύση συν την εξωτερική λύση μείον τους κοινούς όρους στην ενδιάμεση περιοχή άρα

$$y(t) \simeq Y(\frac{t}{\epsilon}) + y_0(t) - \text{κοινοί όροι}$$

ή

$$y(t) \simeq e(1 - e^{-t/\epsilon}) + e^{1-t} - e = e^{1-t} - e^{1-t/\epsilon}.$$

Η παραπάνω διαδικασία με την οποία βρίσκουμε ένα ομοιόμορφο ασυμπτωτικό ανάπτυγμα της λύσης ονομάζεται συναρμογή της εσωτερικής και εξωτερικής λύσης.

Γραμμικός ταλαντωτής με μικρή μάζα Το φαινόμενο του οριακού στρώματος το συναντάμε και στην περίπτωση που έχουμε ένα γραμμικό ταλαντωτή με απόσβεση. Θεωρούμε ένα σώμα μάζας m στην άκρη ενός ελατηρίου. Εάν δώσουμε μια αρχική ώθηση στο σύστημα το σώμα ταλαντώνεται λόγω της δύναμης επαναφοράς του ελατηρίου $-\lambda x$, όπου x η απομάκρυνση από τη θέση ισορροπίας και λ η σταθερά του ελατηρίου. Επίσης θεωρούμε ότι έχουμε δύναμη απόσβεσης (π.χ. λόγω τριβής) ανάλογη της ταχύτητας του ελατηρίου, $-k\dot{x}$ όπου k μια θετική σταθερά. Από το δεύτερο νόμο του Newton έχουμε

$$m\ddot{x}(t) = -\lambda x(t) - k\dot{x}(t), \quad t > 0.$$

Θεωρούμε για αρχικές συνθήκες $x(0) = 0$, $\dot{x}(0) = V$, δηλαδή τη χρονική στιγμή $t = 0$ το σώμα βρίσκεται στη θέση ισορροπίας και έχει μία αρχική ταχύτητα V . Για τα χαρακτηριστικά μεγέθη του προβλήματος έχουμε $[m] = M$, $[k] = MT^{-1}$, $[\lambda] = MT^{-2}$. Εφαρμόζοντας διαστατική ανάλυση βρίσκουμε ότι έχουμε την αδιάστατη παράμετρο ϵ με $\epsilon^2 = \frac{m\lambda}{k^2}$, όπου για μικρή μάζα του σώματος που ταλαντώνεται μπορούμε να υποθέσουμε ότι $\epsilon \ll 1$.

Μπορούμε να κανονικοποιήσουμε το χρόνο θέτοντας $s = \frac{t}{T}$, όπου s η αδιάστατη μεταβλητή και T ένας χαρακτηριστικός χρόνος. Για το χαρακτηριστικό χρόνο T έχουμε τις εξής επιλογές :

α) $T = \frac{m}{k}$ και τότε η εξίσωση γίνεται $\ddot{x} + \dot{x} + \epsilon^2 x = 0$ ή για τους όρους πρώτης τάξης $\ddot{x} + \dot{x} = 0$. Αυτή η κανονικοποίηση είναι κατάλληλη για μικρούς χρόνους (κοντά στο $s = 0$).

β) $T = \sqrt{\frac{m}{\lambda}}$ και η εξίσωση γίνεται $\epsilon\ddot{x} + \dot{x} + \epsilon x = 0$ όπου για τους όρους πρώτης τάξης δίνει $\dot{x} = 0$. Αυτή η κανονικοποίηση δεν είναι χρήσιμη.

γ) $T = \frac{k}{\lambda}$ η οποία δίνει $\epsilon^2\ddot{x} + \dot{x} + x = 0$ όπου για τους όρους πρώτης τάξης έχουμε $\dot{x} + x = 0$ η οποία είναι καλή προσέγγιση για μεγάλους χρόνους. Αυτό συμβαίνει γιατί παίρνουμε μια εξίσωση πρώτης τάξης η οποία δεν μπορεί να

ικανοποιήσει τις δυο συνοριακές συνθήκες στο $t = 0$ (η μεγιστοβάθμια παράγωγος της εξίσωσης είναι πολλαπλασιασμένη με ϵ^2). Η λύση της προσεγγιστικής εξίσωσης είναι $x_0 = Ae^{-\lambda t/k}$ για A μια σταθερά που θα προσδιοριστεί από τη συναρμογή των λύσεων.

Βλέπουμε ότι έχουμε ένα οριακό στρώμα κοντά στο $t = 0$. Θέλουμε να εφαρμόσουμε κατάλληλη κανονικοποίηση έτσι ώστε να επαναφέρουμε τον όρο y'' στην εξίσωση ως πρωτεύοντα όρο. Θέτουμε $s = \delta\tau$ για κάποιο δ που θα προσδιορίσουμε. Το πρόβλημα γίνεται

$$\frac{\epsilon^2}{\delta^2} \frac{d^2x}{d\tau^2} + \frac{1}{\delta} \frac{dx}{d\tau} + x = 0.$$

Πρέπει να έχουμε είτε $\frac{\epsilon^2}{\delta^2} = O(1)$ έτσι ώστε ο πρώτος και ο τρίτος όρος της εξίσωσης να είναι της ίδιας τάξης, ή

$$\frac{\epsilon^2}{\delta^2} = O\left(\frac{1}{\delta}\right)$$

έτσι ώστε ο πρώτος και ο δεύτερος όρος της εξίσωσης να είναι της ίδιας τάξης. Στην πρώτη περίπτωση έχουμε $\delta = \epsilon$ και άρα $\frac{dx_0}{d\tau} = 0$, οπότε δεν είναι αυτή η σωστή επιλογή του δ , διότι στους όρους πρώτης τάξης δεν εμφανίζεται ο όρος \ddot{x} . Στη δεύτερη περίπτωση παίρνουμε $\delta = \epsilon^2$ και το πρόβλημα για τους όρους πρώτης τάξης γίνεται

$$\frac{d^2x_0}{d\tau^2} + \frac{dx_0}{d\tau} = 0.$$

Αυτό είναι το εσωτερικό πρόβλημα (το οποίο παίρνουμε για την περίπτωση (α)), δηλαδή αν κανονικοποιήσουμε το χρόνο με $T = \frac{m}{k}$ και η λύση του είναι $x_0(\tau) = B + Ce^{-\tau} = B + Ce^{-s/\epsilon^2} = B + Ce^{-kt/m}$. Χρησιμοποιώντας τις συνοριακές συνθήκες για $\tau = 0$ παίρνουμε $x_0 = x_i \simeq \frac{Vm}{k}(1 - e^{-kt/m})$. Για την εξωτερική λύση έχουμε $x_0 = Ae^{-\lambda t/k}$. Προκειμένου να πάρουμε ένα ομοιόμορφο ασυμπτωτικό ανάπτυγμα θέλουμε η εξωτερική λύση για $t \rightarrow 0$ να συγκλίνει στο ίδιο σημείο με την εσωτερική για $t \rightarrow \infty$, άρα παίρνοντας τα όρια έχουμε $A = \frac{Vm}{\lambda}$. Το ομοιόμορφο ασυμπτωτικό ανάπτυγμα θα είναι

$$x(t) \simeq \frac{Vm}{k}(1 - e^{-kt/m}) + \frac{Vm}{\lambda}(e^{-\lambda t/k} - 1).$$

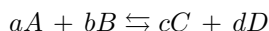
Για μεγαλύτερη ακρίβεια μπορούμε να πάρουμε περισσότερους όρους στο ανάπτυγμα για την εύρεση της εσωτερικής και εξωτερικής λύσης και όχι μόνο τους πρωτεύοντες όρους. Επιπλέον εφαρμόζοντας τη διαδικασία της συναρμογής των λύσεων με τον ίδιο τρόπο όπως και για τους πρωτεύοντες όρους μπορούμε να πάρουμε ένα ομοιόμορφο ασυμπτωτικό ανάπτυγμα συμπεριλαμβάνοντας και όρους υψηλότερης τάξης.

1.7 Κινητική Χημικών Αντιδράσεων

Η κινητική χημικών αντιδράσεων ακολουθεί τον παρακάτω νόμο που διατυπώθηκε το 1867 από τους Guldberg και Waage.

Νόμος Δράσης της Μάζας (Law of mass action) Ο ρυθμός μιας χημικής αντίδρασης είναι ανάλογος με τη συγκέντρωση των αντιδρώντων που λαμβάνουν μέρος υψωμένη σε δύναμη ίση με τη στοιχειομετρική σταθερά τους.

Παράδειγμα Για τη χημική αντίδραση



όπου A, B, C, D είναι οι χημικές ενώσεις ή στοιχεία που μετέχουν στην αντίδραση και a, b, c, d οι στοιχειομετρικές σταθερές τους αντίστοιχα έχουμε ότι ο ρυθμός της ευθείας αντίδρασης (\rightarrow) είναι $k_f [A]^a [B]^b$, ενώ ο ρυθμός της αντίστροφης αντίδρασης (\leftarrow) είναι $k_r [C]^c [D]^d$ όπου με $[X]$ συμβολίζουμε την συγκέντρωση του στοιχείου X . Ο συνολικός ρυθμός της αντίδρασης θα είναι

$$k_f [A]^a [B]^b - k_r [C]^c [D]^d,$$

όπου k_f και k_r είναι σταθερές αναλογίας. Σε συνθήκη χημικής ισορροπίας έχουμε ότι

$$k_f [A]^a [B]^b = k_r [C]^c [D]^d,$$

και η σταθερά ισορροπίας k_{eq} είναι

$$k_{eq} = \frac{k_f}{k_r} = \frac{[A]^a [B]^b}{[C]^c [D]^d}.$$

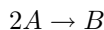
Παραδείγματα στοιχειωδών χημικών αντιδράσεων είναι τα εξής :

α)



Σε αυτή την περίπτωση ένα mole του A κατά την αντίδραση παράγει ένα mole του B . Ο ρυθμός της αντίδρασης είναι $-k[A]$ και η εξίσωση που περιγράφει τη μεταβολή της συγκέντρωσης του A είναι $\frac{d[A]}{dt} = -k[A]$ όπου k είναι η σταθερά της αντίδρασης.

β)



Σε αυτή την περίπτωση δύο mole του A κατά την αντίδραση παράγουν ένα mole του B . Η εξίσωση που περιγράφει τη μεταβολή της συγκέντρωσης του A είναι $\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^2$ όπου k είναι η σταθερά της αντίδρασης.

Για την αντίδραση του τύπου

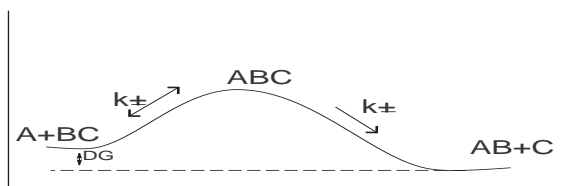


όμοια έχουμε $\frac{d[A]}{dt} = -k[A][B]$.

Αντιδράσεις του τύπου $A + B + C \rightarrow D$ συμβαίνουν σπάνια και είναι αρκετά πολύπλοκες όσον αφορά στο μηχανισμό τους.

Σχέση σταθεράς χημικής αντίδρασης και θερμοκρασίας Οι μονάδες της σταθεράς της χημικής αντίδρασης είναι τέτοιες ώστε τα δύο μέλη της εξίσωσης να είναι συμβατά όσον αφορά στις μονάδες τους. Για παράδειγμα για την αντίδραση $A \rightarrow B$ όπου $\frac{d[A]}{dt} = -k[A]$ έχουμε $[k] = T^{-1}$ ενώ για την αντίδραση $\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^2$ έχουμε $[k] = L^3M^{-1}T^{-1}$.

Επίσης η σταθερά της χημικής αντίδρασης k γενικά εξαρτάται από τη θερμοκρασία. Ο λόγος για αυτό είναι ότι σύμφωνα με τη θεωρία αλλαγής φάσης του Eyring μια χημική αντίδραση πρέπει να υπερβεί ένα ποσό ενέργειας για να εξελιχθεί.



Σχήμα 1.5: Μεταβολή της ενέργειας κατά τη διάρκεια μιας χημικής αντίδρασης.

Τα προϊόντα $A + BC$ έχουν κάποιο ποσό ενέργειας λόγω του χημικού δυναμικού τους για δεδομένη θερμοκρασία και πίεση. Κατά τη διάρκεια μιας χημικής αντίδρασης έχουμε μια μεταβολή αυτής της εσωτερικής ενέργειας που οδηγεί σε μια στάσιμη κατάσταση (ασταθής) σχηματίζοντας το σύμπλεγμα ABC_{\ddagger}^{\pm} . Κατόπιν το σύστημα οδηγείται σε μία καινούργια στάσιμη κατάσταση (ευσταθής) δημιουργώντας τα προϊόντα $AB + C$. Σχηματικά έχουμε



Η μεταβολή της ενέργειας από την αρχική στην τελική κατάσταση, $\Delta E = E_{act}$, που είναι απαραίτητη για να πραγματοποιηθεί η χημική αντίδραση ονομάζεται ενέργεια ενεργοποίησης της αντίδρασης (Activation Energy) και είναι ίση με τη μεταβολή της εσωτερικής ενέργειας του συστήματος ΔG (με $\Delta G < 0$ λόγω εντροπίας) που χρειάζεται το σύστημα για το σχηματισμό ευσταθούς προϊόντος.

Ο ρυθμός της χημικής αντίδρασης αυξάνεται με τη θερμοκρασία και σύμφωνα με το νόμο του Arrhenius έχουμε ότι

$$k = A_e e^{-\frac{E_{act}}{RT}},$$

ή $\ln\left(\frac{k}{A}\right) = -\frac{E_{act}}{RT}$, όπου

E_{act} είναι η ενέργεια της αντίδρασης ($J \text{ mole}^{-1}$),

T η θερμοκρασία ($^{\circ}K$)

R η παγκόσμια σταθερά αερίων ($= 8.314 J \text{ mole}^{-1} \text{ }^\circ K^{-1}$)
 A_e σταθερά αναλογίας.

Για δύο διαφορετικές θερμοκρασίες T_1 και T_2 έχουμε

$$\frac{k(T_1)}{k(T_2)} = \exp\left(\frac{E}{RT_1} - \frac{E}{RT_2}\right)$$

ή

$$k(T_1) = k(T_2) \exp\left(\frac{E}{RT_1 T_2}(T_1 - T_2)\right).$$

Σε πολλά συστήματα συμβαίνει να έχουμε μεγάλη τιμή για την ενέργεια ενεργοποίησης της αντίδρασης σε σχέση με τις διακυμάνσεις της θερμοκρασίας, οπότε ο λόγος $\frac{E}{RT_1 T_2}$ παραμένει σχεδόν σταθερός και η παραπάνω σχέση γίνεται $k(T_1) = k(T_2) \theta^{(T_1 - T_2)}$, για $\theta = \exp\left(\frac{E}{RT_1 T_2}\right)$.

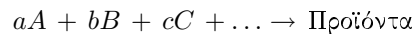
Η προσέγγιση Frank - Kamenetskii Η παραπάνω προσέγγιση μπορεί να περιγραφεί πιο αναλυτικά με τον ακόλουθο τρόπο. Θεωρούμε τον νόμο του Arrhenious, $k = A_e e^{-\frac{E_{act}}{RT}}$, για τον οποίο υποθέτουμε ότι η ενέργεια της αντίδρασης E_{act} είναι μεγάλη. Έστω T_c μια χαρακτηριστική τιμή για τη θερμοκρασία της χημικής αντίδρασης (π.χ. αν η χημική αντίδραση λαμβάνει χώρα σε ένα εύρος $100^\circ C - 200^\circ C$ θα μπορούσαμε να πάρουμε σαν χαρακτηριστική θερμοκρασία $T_c = 100^\circ C$) και ότι $\frac{E_{act}}{RT_c} \gg 1$ επειδή $E_{act} \gg 1$. Θέτουμε $\frac{E_{act}}{RT_c} = \frac{1}{\epsilon}$ με $\epsilon \ll 1$.

Χρησιμοποιούμε το μετασχηματισμό $T = T_c(1 + \epsilon u)$ όπου u η νέα αδιάστατη θερμοκρασία. Τότε

$$\begin{aligned} -\frac{E_{act}}{RT} &= -\frac{E_{act}}{RT_c(1 + \epsilon u)} = -\frac{1}{\epsilon} \frac{1}{1 + \epsilon u} = -\frac{1}{\epsilon} \frac{1 + \epsilon u - \epsilon u}{1 + \epsilon u} \\ &= -\frac{1}{\epsilon} \left(1 - \frac{\epsilon u}{1 + \epsilon u}\right) = -\frac{1}{\epsilon} + \frac{u}{1 + \epsilon u} \simeq -\frac{1}{\epsilon} + u. \end{aligned}$$

Άρα τελικά $A_e e^{-\frac{E_{act}}{RT}} \simeq A_e e^{-\frac{1}{\epsilon}} e^u$.

Τάξη Αντίδρασης Γενικά για μια αντίδραση της μορφής



ο ρυθμός της αντίδρασης είναι

$$k[A]^a [B]^b [C]^c \dots$$

και η τάξη της αντίδρασης $a + b + c + \dots$

Μία αντίδραση της οποίας η εξίσωση είναι της μορφής $\frac{d[A]}{dt} = -k_0$, είναι μηδενικής τάξης. Για παράδειγμα ετερογενείς πολύπλοκες αντιδράσεις που συμβαίνουν σε πολλά βήματα έχουν ρυθμό αυτής της μορφής. Παράδειγμα τέτοιου

είδους αντίδρασης έχουμε στη παραγωγή μεθανίου. Εδώ $[k_0] = ML^{-3}T^{-1}$ και $[A] = [A_0] + k_0t$, για $[A](0) = A_0$.

Η αντίδραση $A \rightarrow B$ είναι πρώτης τάξης. Εδώ $\frac{d[A]}{dt} = -k_1[A]$, $\frac{d[B]}{dt} = -k_1[A]$, όπου $[k_1] = T^{-1}$. Λύνοντας τις εξισώσεις αυτές έχουμε $[A] = [A_0]e^{-k_1t}$, και $\frac{d[B]}{dt} = -k_1[A_0]e^{-k_1t}$ ή $[B] = [A_0](1 - e^{-k_1t})$ όπου η αρχική συγκέντρωση είναι $[A](0) = A_0$.

Παραδείγματα τέτοιων αντιδράσεων βρίσκουμε στην περίπτωση μείωσης ραδιοϊσοτόπων, στη βιομηχανική κατανάλωση οξυγόνου, στην αναπνοή βακτηριδίων, άλγης κ.τ.λ.

Η αντίδραση $A + A \rightarrow B$ είναι δεύτερης τάξης. Όσον αφορά στο ρυθμό μεταβολής της συγκέντρωσης του A έχουμε $\frac{d[A]}{dt} = -k_2[A]^2$, και $[A](t) = \frac{[A_0]}{[A_0]k_2t + 1}$. Όμοια η αντίδραση $A + B \rightarrow C$ είναι δεύτερης τάξης και $\frac{d[A]}{dt} = -k_2[A][B]$ και $[B] = [B_0] -$ το μέρος του B που έχει αντιδράσει $= [B_0] - ([A_0] - [A])$. Για $[B_0] > [A_0]$ έχουμε τη λύση της εξίσωσης

$$\ln\left(\frac{[A]}{[B]}\right) - \ln\left(\frac{[A_0]}{[B_0]}\right) = -k_2([A_0] - [B_0])t.$$

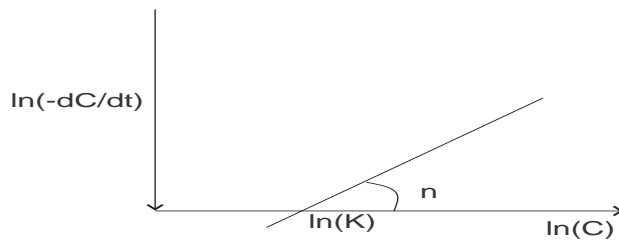
Η αντίδραση $A + R \rightarrow 2R$ η οποία είναι αυτοκαταλυτική παρουσιάζει την ίδια συμπεριφορά.

Παράδειγμα αντίδρασης δεύτερης τάξης έχουμε στη διαδικασία σχηματισμού κρυστάλλων, στην κινητική βακτηριδίων κ.τ.λ.

Γενικά σε μία αντίδραση n τάξης για τη συγκέντρωση C του αντιδρώντος έχουμε

$$\frac{dC}{dt} = -kC^n.$$

Η τάξη της αντίδρασης n μπορεί να υπολογιστεί από τη σχέση $\ln\left(-\frac{dC}{dt}\right) = n \ln(C) + \ln(k)$. Μετρώντας πειραματικά το ρυθμό $\frac{dC}{dt}$ και τη συγκέντρωση C για διάφορες χρονικές στιγμές έχουμε ότι η τάξη της αντίδρασης είναι ίση με την κλίση της ευθείας του γραφήματος της ποσότητας $\ln\left(-\frac{dC}{dt}\right)$ ως προς $\ln(C)$.



Σχήμα 1.6: Γραφικός υπολογισμός της τάξης n μιας χημικής αντίδρασης.

Συστήματα Αντιδράσεων Πολλές φορές καλούμαστε να μοντελοποιήσουμε φαινόμενα που σχετίζονται με συστήματα αντιδράσεων δηλαδή δύο ή περισσότερες αντιδράσεις λαμβάνουν χώρα ταυτόχρονα. Παραδείγματα τέτοιων αντιδράσεων είναι :

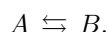
- $A \rightarrow B \rightarrow C,$
- $NH_3 - N \rightarrow NO_2^- - N \rightarrow NO_3^- - N,$
- $NH_3 + \frac{3}{2}O_2 \rightarrow NO_2^- + H^+ + H_2O$
 $NO_2^- + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow NO_3^-$
 $NH_3 + 2O_2 \rightarrow NO_3^- + H^+ + H_2O.$

Για το τελευταίο παράδειγμα θεωρώντας ότι το οξυγόνο μετέχει στην αντίδραση πολύ λίγο, με την έννοια ότι βρίσκεται σε αφθονία και η συγκέντρωση του παραμένει σχεδόν σταθερή κατά τη διάρκεια της αντίδρασης, η συγκέντρωση του O_2 μπορεί να απορροφηθεί στη σταθερά της αντίδρασης. Θέτοντας $[[NH_3]] = A,$ $[[NO_2]] = B,$ $[[NO_3]]$ έχουμε ότι :

$$\begin{aligned}\frac{dA}{dt} &= -k_1A \\ \frac{dB}{dt} &= k_1A - k_2B \\ \frac{dC}{dt} &= k_2B.\end{aligned}$$

Λύνοντας το παραπάνω σύστημα έχουμε $A = A_0e^{-k_1t}$ και $\frac{dB}{dt} = k_1A_0e^{-k_1t} - k_2B$ ή $B = B_0e^{-k_2t} + e^{-k_2t} \int_0^t e^{k_2s}(k_1A_0e^{-k_1s})ds.$ Θέτοντας $N_T = A_0 + B_0 + C_0$ έχουμε $C = N_T - A_0e^{-k_1t} - B_0e^{-k_2t} - \frac{A_0k_1}{k_2 - k_1}(e^{-k_1t} - e^{-k_2t}).$

Αμφίδρομες Αντιδράσεις Μια αμφίδρομη αντίδραση έχει τη μορφή



Σε αυτή την περίπτωση έχουμε το ακόλουθο σύστημα για τις συγκεντρώσεις των A και $B.$

$$\begin{aligned}\frac{d[A]}{dt} &= -k_1[A] + k_2[B], \\ \frac{d[B]}{dt} &= k_1[A] - k_2[B],.\end{aligned}$$

Επειδή η συνολική συγκέντρωση $C_T = [A] + [B] = A_0 + B_0$ για $A_0 = [A](0),$ $B_0 = [B](0),$ δηλαδή η συνολική ποσότητα υλικού στην αντίδραση παραμένει σταθερή, παίρνουμε

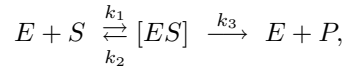
$$\frac{d[A]}{dt} = -k_1[A] + k_2(C_T - [A]),$$

και άρα

$$[A] = A_0 e^{-(k_1+k_2)t} + \frac{k_2 C_T}{k_1+k_2} (1 - e^{-(k_1+k_2)t}).$$

1.7.1 Αντίδραση Michaelis - Menton Κινητική ενζύμων

Η αντίδραση Michaelis - Menton είναι ένα παράδειγμα αντίδρασης που η τάξη της είναι μεταξύ ένα και δύο. Αυτή η αντίδραση ακολουθεί ένα μηχανισμό δύο βημάτων



όπου E είναι το ένζυμο, S είναι το αντιδρών και P είναι το προϊόν. Ο ρόλος του ενζύμου στη χημική αντίδραση είναι ότι μειώνει την ενέργεια ενεργοποίησης της αντίδρασης ενώ παράλληλα αυξάνει το ρυθμό της. Πράγματι για ενέργεια ενεργοποίησης $E_1 > E_2$ έχουμε ότι για το ρυθμό της αντίδρασης ισχύει $k_1 = A e^{-\frac{E_1}{RT}} < k_2 = A e^{-\frac{E_2}{RT}}$.

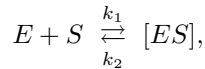
Για τη συγκέντρωση της ένωσης ES έχουμε

$$\frac{d[ES]}{dt} = k_1[E][S] - k_2[ES] - k_3[ES],$$

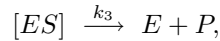
ενώ για το προϊόν P ισχύει

$$\frac{d[P]}{dt} = k_3[ES].$$

Η πρώτη αντίδραση



γίνεται με πολύ πιο γρήγορο ρυθμό σε σχέση με τη δεύτερη



δηλαδή έχουμε $k_3 \ll k_2, k_1$ και μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η αντίδραση $E + S \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} [ES]$, βρίσκεται σε ισορροπία ενώ εξελίσσεται η δεύτερη. Με βάση αυτή την υπόθεση μπορούμε θέσουμε $\frac{d[ES]}{dt} = 0$ και παίρνουμε

$$(k_2 + k_3)[ES] \simeq k_2[ES] = k_1[E][S],$$

ή

$$k_M = \frac{k_2}{k_1} = \frac{[E][S]}{[ES]}.$$

Επιπλέον αν E_T είναι η συνολική ποσότητα ενζύμου που μετέχει στην αντίδραση έχουμε ότι $E_T = E + ES$, άρα

$$[ES] = \frac{[E_T][S]}{k_M + [S]},$$

και

$$\frac{d[P]}{dt} = k_3 \frac{[E_T][S]}{k_M + [S]}.$$

Ο όρος $[E_T]$ αυξάνει το ρυθμό αντίδρασης και όρος $k_3[E_T] = \mu_{\max}[P]$ είναι ο μέγιστος ρυθμός αύξησης του προϊόντος και η εξίσωση γίνεται

$$\frac{d[P]}{dt} = \mu_{\max} \frac{[P][S]}{k_M + [S]}, \quad (1.26)$$

με $[S] = S_0 - [P]$, όπου S_0 είναι η αρχική συγκέντρωση του S . Η εξίσωση (1.26) μας δίνει τον ρυθμό της αντίδρασης Michaelis - Menton.

Στη περίπτωση όπου $[S] \ll k_M$ η εξίσωση προσεγγιστικά γίνεται

$$\frac{d[P]}{dt} \simeq \frac{\mu_{\max}}{k_M} [P][S],$$

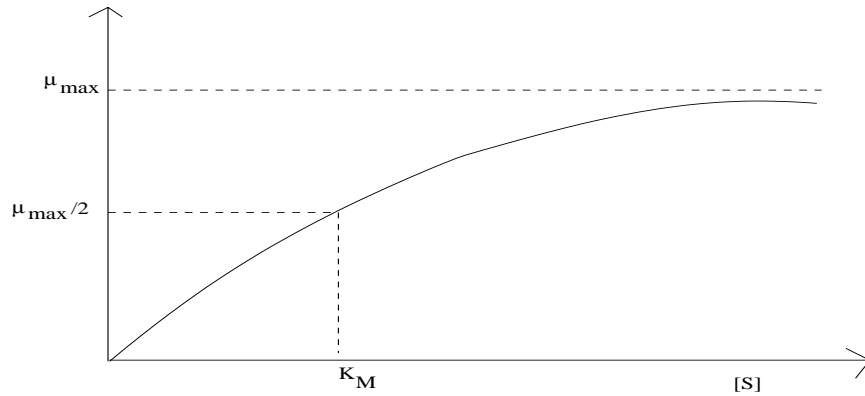
δηλαδή χαρακτηρίζεται από τη συμπεριφορά μιας αντίδρασης δεύτερης τάξης, ενώ εάν $[S] \gg k_M$ έχουμε ότι

$$\frac{d[P]}{dt} \simeq \mu_{\max}[P],$$

δηλαδή χαρακτηρίζεται από τη συμπεριφορά μιας αντίδρασης πρώτης τάξης.

Επιπλέον ο ρυθμός αύξησης της αντίδρασης, μ δίνεται από τη σχέση

$$\mu = \frac{d[P]}{dt} = \mu_{\max} \frac{[S]}{k_M + [S]}.$$



Σχήμα 1.7: Ρυθμός αύξησης της αντίδρασης Michaelis - Menton.

1.8 Παράδειγμα Χημικής Αντίδρασης Κανονικοποίηση - Οριακό στρώμα

Θεωρούμε μια χημική ουσία συγκέντρωσης c η οποία υπόκειται σε μια ισόθερμη αντίδραση δεύτερης τάξης σε ένα χωρίο το οποίο μπορεί να θεωρηθεί μονοδιάστατο, μήκους L . Έχουμε ότι $c = c(x, t)$, $0 \leq x \leq L$, $t > 0$. Η συγκέντρωση της χημικής ουσίας ικανοποιεί την εξίσωση της διάχυσης :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - kc^2.$$

Η χημική αντίδραση καταναλώνει τη χημική ουσία με ρυθμό $r(c) = kc^2$, ενώ παράλληλα έχουμε διάχυση της ουσίας στο μονοδιάστατο χωρίο. D είναι ο συντελεστής διάχυσης και k η σταθερά αντίδρασης. Έστω ότι $D = \frac{1}{60} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, $k = \frac{1}{3000} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Επίσης θεωρούμε ότι για $x = 0$ και $x = L$ η συγκέντρωση της χημικής ουσίας είναι ελεγχόμενη και παραμένει σταθερή, $c(0, t) = 50 \text{ kg m}^{-3}$, $c(L, t) = 100 \text{ kg m}^{-3}$.

Θέλουμε να δούμε αν τα D , k είναι 'μικρά' ή 'μεγάλα', δηλαδή αν στη διαδικασία κυριαρχεί η διάχυση, δηλαδή ο όρος $D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$, ή η αντίδραση, δηλαδή ο όρος $-kc^2$.

Αρχικά κανονικοποιούμε τη συγκέντρωση c . Ένα φυσικό μέγεθος αναφοράς για τη συγκέντρωση είναι η τιμή στο σύνορο. Θέτουμε $c_0 = 50 \text{ kg m}^{-3}$ και αν u η αδιάστατη μεταβλητή για τη συγκέντρωση έχουμε $u = \frac{c}{c_0}$. Η χαρακτηριστική κλίμακα για το c είναι τέτοια ώστε $u \sim O(1)$.

Εφαρμόζοντας την παραπάνω κανονικοποίηση στο πρόβλημα έχουμε

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - Au^2.$$
$$u(0, t) = 1, \quad u(L, t) = 2,$$

με $A = 50 \text{ kg m}^{-3} k = \frac{1}{60} \text{ s}^{-1}$.

Βλέπουμε ότι η σταθερά $A = \frac{1}{60} \text{ s}^{-1}$ δείχνει 'μικρή', δηλαδή ότι η αντίδραση είναι αργή σε σχέση με τη διάχυση. Επίσης η σταθερά A μας δίνει μια χρονική κλίμακα που σχετίζεται με την αντίδραση $t_0 = 60 \text{ s}$.

Κανονικοποιούμε το χρόνο με μια κλίμακα αναφοράς, έστω T και $\tau = \frac{t}{T}$, όπου τ ο αδιάστατος χρόνος.

Η εξίσωση γίνεται

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = TD \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - ATu^2.$$
$$= TD \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u^2, \quad \text{για } t_0 = T.$$

Βλέπουμε ότι η αντίδραση μπορεί να θεωρηθεί αργή για μια χρονική κλίμακα της τάξης κάποιων δευτερολέπτων και γρήγορη για μια χρονική κλίμακα της τάξης ωρών.

Έστω ότι $T = 1 \text{ s}$ τότε το πρόβλημα γίνεται

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{60} u^2 \simeq D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

και η αντίδραση δεν παίζει ρόλο στη διαδικασία ($D \gg \frac{1}{60}$). Εάν $T = 3600 \text{ s} = 1 \text{ h}$ έχουμε

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial \tau} &= 3600D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 60u^2. \\ \text{ή } 60D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &\simeq u^2, \end{aligned}$$

δηλαδή για μια τέτοια χρονική κλίμακα το πρόβλημα είναι στάσιμο (ο όρος $\frac{\partial u}{\partial \tau}$ είναι αμελητέος).

Θα μελετήσουμε το στάσιμο πρόβλημα. Το εξελικτικό πρόβλημα που παίρνουμε για $T = 1 \text{ s}$ δεν έχει ενδιαφέρον, διότι δεν 'βλέπουμε' το φαινόμενο της αντίδρασης στη διαδικασία.

Θέλουμε να δούμε πόσο σημαντικός είναι ο συντελεστής διάχυσης D . Αυτό, όπως θα δούμε, εξαρτάται στην παρούσα φάση από την κλίμακα αναφοράς του μήκους του προβλήματος. Διακρίνουμε τις περιπτώσεις :

- a) $L = \frac{1}{10} \text{ mm}$ π.χ. αν το σώμα είναι τριχοειδές
- b) $L = 1 \text{ m}$ π.χ. αν το σώμα είναι ένας βιομηχανικός αντιδραστήρας.

Οι δύο όροι $D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ και Au^2 ισορροπούν, αν έχουμε ένα ενδιάμεσο μήκος σε σχέση με τις περιπτώσεις (a) και (b). Πράγματι αν l είναι ένα μήκος αναφοράς και $x = ly$, όπου y το αδιάστατο μήκος, έχουμε

$$D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \simeq Au^2,$$

με $D = \frac{1}{60} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, $A = \frac{1}{60} \text{ s}^{-1}$, ή κανονικοποιώντας

$$\frac{D}{l^2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \simeq Au^2,$$

και

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \simeq u^2,$$

για $l^2 = \frac{D}{A} = 1 \text{ cm}^2$, $l = 1 \text{ cm}$.

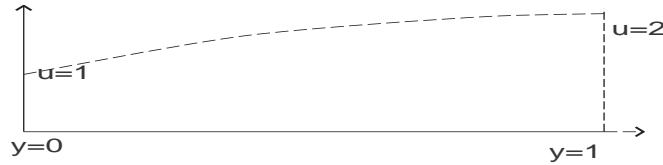
Θα εξετάσουμε την περίπτωση (a). Θέτουμε $l = L = \frac{1}{10} \text{ mm} = \frac{1}{100} \text{ cm}$. Τότε

$$\frac{D}{L^2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \simeq Au^2,$$

με $\frac{D}{L^2} = \frac{1}{60} 10^4 \text{ s}^{-1}$. Άρα

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \simeq \epsilon u^2,$$

με $\epsilon = 10^{-4}$ και $u(0) = 1$, $u(1) = 2$. Ισοδύναμα έχουμε $u_{yy} \simeq 0$ και $u \simeq 1 + y$, συνυπολογίζοντας τις συνοριακές συνθήκες. Τελικά $c \simeq 50(1 + 100x) \text{ kg m}^{-3}$, μετρώντας το x σε cm .



Σχήμα 1.8: Αρχική συνθήκη για τη συγκέντρωση.

Για την περίπτωση (b) έχουμε $l = L = 1 \text{ m} = 100 \text{ cm}$ και η εξίσωση γίνεται

$$\frac{D}{L^2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \simeq u^2,$$

με $\frac{D}{L^2} = \frac{1}{60} 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. Άρα

$$\epsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \simeq u^2,$$

με $\epsilon = 10^{-2}$ και $u(0) = 1$, $u(1) = 2$.

Εδώ το D είναι 'μικρό' δηλαδή η διάχυση είναι πιο αργή διαδικασία σε σχέση με την αντίδραση. Το πρόβλημα δίνει $u \simeq 0$, η προσέγγιση αυτή όμως δεν ικανοποιεί τις συνοριακές συνθήκες στο σύνορο $u = 1$ για $y = 0$ και $u = 2$ για $y = 1$, άρα έχουμε συνοριακό στρώμα στα σημεία $y = 0$ και $y = 1$.

Κοντά στο $y = 0$ εφαρμόζουμε την αλλαγή κλίμακας $y = \epsilon z$, έτσι ώστε ο συντελεστής του όρου $\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ να γίνει μονάδα, και έχουμε

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} &\simeq u^2, & (1.27) \\ u(0) &= 1, \quad \lim_{z \rightarrow \infty} u(z) = 0. \end{aligned}$$

Η συνοριακή συνθήκη $\lim_{z \rightarrow \infty} u(z) = 0$ εκφράζει το γεγονός ότι μακριά από το $z = 0$ η u πρέπει να είναι μηδέν. Επίσης

$$\frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right) \frac{\partial u}{\partial z},$$



Σχήμα 1.9: Συνοριακά στρώματα κοντά στα σημεία $y = 0$ και $y = 1$.

άρα

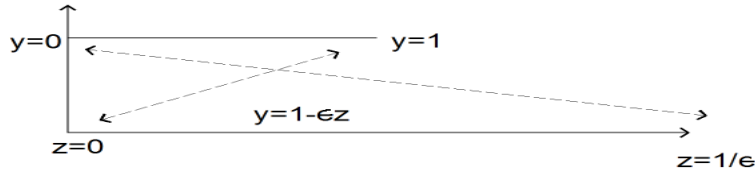
$$\int \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} du = \int u^2 du \quad \text{ή}$$

$$\int \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right) \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{u^3}{3} + C \quad \text{ή}$$

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 = \frac{u^3}{3} + C.$$

Έχουμε ότι $\frac{\partial u}{\partial z} < 0$ άρα $\frac{\partial u}{\partial z} = -\left(\frac{2}{3} + C'\right)^{1/2}$. Επειδή για $z \rightarrow \infty$ ισχύει ότι $u = 0$ και $\frac{\partial u}{\partial z} = 0$ παίρνουμε $C' = 0$. Επομένως $\frac{\partial u}{\partial z} = -\sqrt{\frac{2}{3}}u^{3/2}$ και $u^{-1/2} = \frac{1}{\sqrt{6}}z + B$ όπου $B = -C'/2$. Από τη συνοριακή συνθήκη $u(0) = 1$ παίρνουμε ότι $B = 1$ και τελικά $u = \frac{6}{(z + \sqrt{6})^2}$.

Κοντά στο $y = 1$ θέτουμε $y = 1 - \epsilon z$. Το πρόβλημα γίνεται



Σχήμα 1.10: Αλλαγή μεταβλητών $y = 1 - \epsilon z$.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \simeq u^2,$$

$$u(0) = 2, \quad \lim_{z \rightarrow \infty} u(z) = 0.$$

Όμοια παίρνουμε $\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 = \frac{u^3}{3} + C$, όπου $C = 0$ επειδή $u = \frac{\partial u}{\partial z} = 0$ για $z \rightarrow \infty$.

Άρα $u^{-1/2} = \frac{1}{\sqrt{6}}z + B$ και δεδομένου ότι $u(0) = 2$ έχουμε $B = 1/\sqrt{2}$. Τελικά
 $u = \frac{6}{(z+\sqrt{3})^2}$.

Κάνοντας τη συναρμογή των λύσεων έχουμε

$$u \simeq \frac{6}{\left(\frac{y}{\epsilon} + \sqrt{6}\right)^2} + \frac{6}{\left(\frac{1-y}{\epsilon} + \sqrt{3}\right)^2}.$$

Η παραπάνω έκφραση, επιστρέφοντας στις διαστατικές μεταβλητές, γίνεται

$$c(x) \simeq 6c_0\epsilon^2 L^2 \left[(x + \epsilon\sqrt{6}L)^{-2} + (L + \epsilon\sqrt{3}L - x)^{-2} \right].$$

Κεφάλαιο 2

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΜΕ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΤΟ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ

2.1 Μαθηματικά μοντέλα για το φαινόμενο του θερμοκηπίου

Η δραματική αύξηση του πληθυσμού της Γης αλλά και η αύξηση της κατά κεφαλή κατανάλωσης πόρων ειδικά στις βιομηχανοποιημένες κοινωνίες έχει άμεσες επιπτώσεις στο περιβάλλον. Η πιο σημαντική ίσως είναι αυτή που έχει να κάνει με την αλλαγή του κλίματος της Γης. Η απελευθέρωση μεγάλων ποσοτήτων αερίων CO_2 , CH_4 , N_2O κτλ. στην ατμόσφαιρα λόγω ανθρώπινων δραστηριοτήτων (πχ. εξατμίσεις, λιπάσματα κτλ.) προκαλεί μεταβολή της θερμοχωρητικότητας της ατμόσφαιρας (εγκλωβίζεται θερμότητα) πράγμα που έχει σαν αναμενόμενο αποτέλεσμα την αύξηση της μέσης θερμοκρασίας της Γης. Αυτό το φαινόμενο ονομάζεται φαινόμενο του θερμοκηπίου μια και ανάλογος είναι και ο μηχανισμός θέρμανσης ενός θερμοκηπίου.

Για να κατασκευάσουμε ένα μοντέλο για το φαινόμενο αυτό θα πρέπει πρώτα να κατανοήσουμε πως μπορούμε να φτιάξουμε ένα μοντέλο για τις φυσιολογικές μεταβολές της θερμοκρασίας της Γης.

2.1.1 Θερμοκρασιακές μεταβολές της Γης

Η Γη θερμαίνεται από την ακτινοβολία του Ηλίου. Αυτή απορροφάται κατά 30% από τα σύννεφα, 25% από την ατμόσφαιρα και το υπόλοιπο 45% απορροφάται ή αντανακλάται από τη βλάστηση, το έδαφος ή τους ωκεανούς.

Σε κάθε μέσο η εισροή θερμότητας προκαλεί μεταβολή της θερμοκρασίας του μέσου που οδηγεί σε ανταλλαγή (εξροή) θερμότητας μέσω ακτινοβολίας ή επαφής με άλλα σώματα ή το διάστημα. Επιπλέον, αφού σε διαφορετικά σώματα - συνιστώσες της Γης (έδαφος, ατμόσφαιρα κτλ.) έχουμε διαφορετική επίδραση της εισροής θερμότητας από τον Ήλιο, έχουμε και διαφοροποίηση στην μεταφορά ενέργειας στις διάφορες συνιστώσες της Γης (πχ. ανταλλαγή θερμότητας ανάμεσα στο έδαφος και την ατμόσφαιρα).

Μεταβολές επίσης παρατηρούνται μεταξύ τροπικών και πολικών περιοχών ή σε σχέση με τη χρονική διάρκεια μίας ημέρας ή ενός έτους. Αυτό που κατά βάση πρέπει να προσδιορίσουμε είναι ποιό "χομμάτι" της Γης και της ατμόσφαιρας συνεισφέρει στην ανταλλαγή θερμότητας με τον Ήλιο.

Γενικά μια μικρή αλλαγή στη θερμοχωρητικότητα της Γης θα προκαλέσει μικρές αλλαγές στη θερμοκρασία της Γης αυτές όμως μπορεί να είναι σημαντικές για τη ζωή στη Γη. Επίσης βασικό στοιχείο της διαδικασίας είναι η χρονική κλίμακα στην οποία έχουμε αγωγή θερμότητας σε ένα σώμα όπως η Γη.

Εάν για τη Γη θεωρήσουμε σαν χαρακτηριστικό συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας αυτόν του γρανίτη, k η χρονική κλίμακα για τη διάχυση θερμότητας στη Γη είναι $\frac{R^2}{k} \sim 94 \cdot 10^6$ χρόνια, όπου R η ακτίνα της Γης. Αυτό μας λέει ότι πολύ λίγο της Γης επηρεάζεται από αλλαγές στην εισροή θερμότητας στη διάρκεια μίας ημέρας, έτους ή της περιόδου για την οποία το φαινόμενο του θερμοκηπίου υφίσταται δηλαδή περίπου για 50 χρόνια. Θέλουμε να δούμε οι αλλαγές θερμοκρασίας στην επιφάνεια της Γης μέχρι ποιό βάθος προκαλούν αισθητές μεταβολές. Περιμένουμε αυτό το βάθος να είναι της τάξης του \sqrt{kt} , όπου για $t \sim 50$ χρόνια,

έχουμε $\sqrt{kt} \sim 41.5m$.

2.1.2 Προσωρινές μεταβολές

Αρχικά θα εξετάσουμε την επίδραση των ταλαντώσεων της θερμικής εισροής στο έδαφος της Γης στη διάρκεια μίας ημέρας ή ενός έτους. Η θερμική εισροή στην επιφάνεια της Γης ϕ θεωρούμε ότι μπορεί να εκφραστεί σαν μία σειρά Fourier

$$\phi(0, t) = T_{year} \cos(\omega_{year}t) + T_{day} \cos(\omega_{day}t) + \dots$$

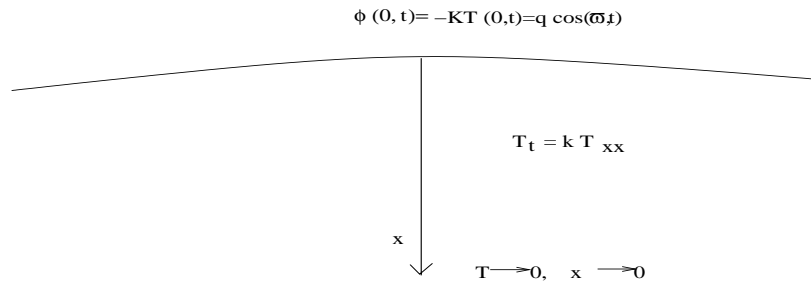
Για λόγους απλοποίησης θα θεωρήσουμε ότι $\phi(0, t) = q \cos(\omega t)$. Έχουμε ότι η θερμοκρασία $T = T(x, t)$, όπου t ο χρόνος και x το βάθος από την επιφάνεια της Γης ικανοποιεί την εξίσωση

$$T_t = kT_{xx}.$$

Επίσης η συνοριακή συνθήκη για $x = 0$ θα έχει τη μορφή

$$-KT_x(0, t) = q \cos(\omega t),$$

και $0 < x < \infty$, $t > 0$ ενώ για $x \rightarrow \infty$ θέλουμε $T(x, t) \rightarrow 0$.



Σχήμα 2.1: Σχηματική αναπαράσταση του μοντέλου

Λόγω της μορφής της συνοριακής συνθήκης θα αναζητήσουμε λύσεις της μορφής

$$T(x, t) = \Re\{F(x)e^{i\omega t}\}.$$

Αντικαθιστώντας την έκφραση $\Re\{F(x)e^{i\omega t}\}$ στην εξίσωση της θερμότητας έχουμε

$$i\omega F(x) = kF''(x), \quad (2.1)$$

ενώ η συνοριακή συνθήκη έχει τη μορφή

$$-KF'(0)e^{i\omega t} = qe^{i\omega t},$$

ή

$$-KF(0) = q.$$

Η λύση της εξίσωσης (2.1) είναι

$$F(x) = C_1 e^{-(i+1)\sqrt{\frac{\omega}{2k}}x} + C_2 e^{(i+1)\sqrt{\frac{\omega}{2k}}x}.$$

Απο τη συνθήκη $T(x, t) \rightarrow 0$, για $x \rightarrow \infty$ έχουμε $F(x) \rightarrow 0$, για $x \rightarrow \infty$ και άρα $C_2 = 0$. Επίσης απο τη συνθήκη $F'(0) = -\frac{q}{K}$ παίρνουμε

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{q}{K\sqrt{\frac{\omega}{2k}}} \frac{1}{1+i} = \frac{q}{\sqrt{K\omega\rho c}} \left(\frac{\sqrt{2}}{2}(i-i) \right) \\ &= \frac{q}{\sqrt{K\omega\rho c}} \left[\cos\left(-\frac{\pi}{4}\right) + i \sin\left(-\frac{\pi}{4}\right) \right] = \frac{q}{\sqrt{K\omega\rho c}} e^{-i\frac{\pi}{4}}. \end{aligned}$$

Τελικά όσων αφορά την $F(x)$ έχουμε

$$F(x) = \frac{q}{\sqrt{K\omega\rho c}} e^{-(i+1)\sqrt{\frac{\omega}{2k}}x - i\frac{\pi}{4}},$$

και

$$T(x, t) = \frac{q}{\sqrt{K\omega\rho c}} e^{-(i+1)\sqrt{\frac{\omega}{2k}}x} e^{i(\omega t - \frac{\pi}{4})},$$

ενώ

$$T(0, t) = \frac{q}{\sqrt{K\omega\rho c}} e^{i(\omega t - \frac{\pi}{4})}.$$

Συμπεράσματα Το πλάτος των ταλαντώσεων \hat{T} της θερμοκρασίας για $x = 0$ είναι $\hat{T}(0, t) = \frac{q}{\sqrt{K\omega\rho c}}$. Επίσης δεν έχουμε μεταφορά θερμότητας σε μεγάλο βάθος γιατί οι ταλαντώσεις φθίνουν εκθετικά με ρυθμό $e^{-\sqrt{\frac{\omega}{2k}}x}$. Η θερμοκρασία για $x = 0$ έχει διαφορά φάσης με τη ροή στο $x = 0$ κατά το $\frac{1}{8}$ της περιόδου. Αν η θερμοκρασία γίνεται μέγιστη το μεσημέρι η μέγιστη θερμοκρασία του εδάφους εντοπίζεται 3 ώρες αργότερα. Για ετήσιες μεταβολές η καθυστέρηση είναι της τάξης των 6 – 7 εβδομάδων. Επίσης εάν αυξάνεται το ω έχουμε μείωση του πλάτους $\hat{T}(0, t)$. Έτσι από τη σχέση $\frac{\omega_{day}}{\omega_{year}} = 365$ έχουμε $\hat{T}_{year} = \sqrt{365}\hat{T}_{day} \simeq 20\hat{T}_{day}$. Άρα $\hat{T}_{day} \ll \hat{T}_{year}$ και σε σχέση με το φαινόμενο του θερμοκηπίου οι μεταβολές στη χρονική διάρκεια μιας ημέρας δεν παίζουν μεγάλο ρόλο.

Όσων αφορά το βάθος της επίδρασης των επιφανειακών μεταβολών πρέπει το x να είναι τέτοιο ώστε ο όρος $\exp\left(\sqrt{-\frac{\omega}{2k}}x\right)$ να είναι αμελητέος. Ένα τέτοιο μήκος είναι $l_\omega = 5\sqrt{\frac{2k}{\omega}}$. Για $k = 10^{-6} \frac{w^2}{sec}$ (συντελεστής θερμικής διάχυσης του γρανίτη) το βάθος επίδρασης είναι $l_\omega \sim 0.8m$ για τη χρονική διάρκεια μιας ημέρας ενώ $l_\omega \sim 16m$ για τη χρονική διάρκεια ενός έτους. Βλέπουμε ότι μόνο 16m βάθους παίζουν ρόλο στην ανταλλαγή θερμότητας του εδάφους με τον Ήλιο.

Η ανάλογη ποσότητα για τους ωκεανούς είναι $l \sim 1.8m$ για τη διάρκεια ενός χρόνου. Αν και παρόλα αυτά για τη διάχυση θερμότητας στους ωκεανούς πρέπει να συνυπολογίσουμε και άλλους παράγοντες πχ. θαλάσσια ρεύματα κτλ. αυτή η τιμή είναι ενδεικτική.

Ο όρος

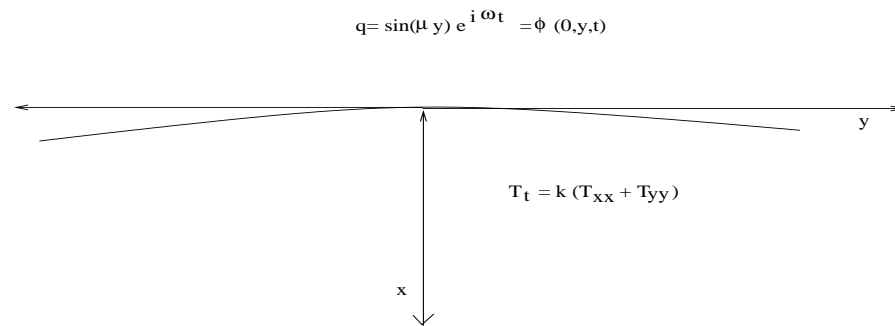
$$\exp\left(i\left(\omega t - \frac{\pi}{4} - \sqrt{\frac{\omega}{2k}}x\right)\right)$$

συνδέεται με τη ταλάντωση και υποδεικνύει ότι το φαινόμενο που μελετάμε χαρακτηρίζεται από ένα θερμικό κύμα ταχύτητας $\sqrt{2k\omega}$.

Για αυξανόμενη συχνότητα ω το πλάτος $\hat{T}(0, t)$ μειώνεται κατά $\frac{1}{\sqrt{\omega}}$ και άρα οι ταλαντώσεις με μεγαλύτερη συχνότητα αποσβένονται πιο γρήγορα από αυτές με χαμηλή συχνότητα. Η Γη ενεργεί σαν φυσικό φίλτρο μεταφέροντας υψηλότερες συχνότητες σε ανώτερα στρώματα. Μετρώντας τη θερμοκρασία της Γης σε βάθος έχουμε πληροφορίες για χαμηλές συχνότητες όπως για παράδειγμα ταλαντώσεις που οφείλονται σε ηλιακές κηλίδες, φαινομένου με περίοδο 11-14 χρόνια περίπου.

2.1.3 Χωρικές μεταβολές

Θα εξετάσουμε πως μεταβάλλεται το προηγούμενο μοντέλο αν θεωρήσουμε χωρική διακύμανση στην εισροή θερμοκρασίας. Έστω ότι $q = \sin(\mu y)e^{i\omega t} = \phi(0, y, t)$ ενώ $T = T(x, y, t)$.



Σχήμα 2.2: Σχηματική αναπαράσταση του μοντέλου

Για την εξίσωση

$$T_t = k(T_{xx} + T_{yy}),$$

αναζητούμε λύσεις της μορφής

$$T(x, y, t) = \tilde{T}(x) \sin(\mu y) e^{i\omega t},$$

και παίρνουμε

$$\tilde{T}'' - \left[\mu^2 + \frac{i\omega}{k}\right]\tilde{T} = 0. \quad (2.2)$$

Βλέπουμε ότι ο όρος $\frac{\omega}{k}$ που έχει διαστάσεις L^{-2} αντιστοιχεί σε ένα μήκος που σχετίζεται με τις μεταβολές θερμότητας στο βάθος του εδάφους, l_ω . Ο όρος μ^2 , (όμοια $[\mu^2] = L^{-2}$) σχετίζεται με τις διακυμάνσεις της θερμοκρασίας στο γεωγραφικό πλάτος της Γης, l_h .

Έχουμε ότι $l_\omega \sim 16m$ όπως υπολογίσαμε στην πιο απλή εκδοχή του μοντέλου και για να δούμε τις αισθητές μεταβολές κατά πλάτος στην επιφάνεια της Γης η απόσταση πρέπει να είναι $l_h > 500Km$, άρα $\mu^2 \ll \frac{\omega}{k}$. Επειδή η λύση της εξίσωσης (2.2) είναι της μορφής

$$\tilde{T} = Ce^{-\sqrt{(\mu^2 + i\frac{\omega}{k})x}} \simeq Ce^{-\sqrt{i\frac{\omega}{k}}x},$$

προσεγγιστικά έχουμε την ίδια μορφή λύσης που παίρνουμε αν δεν θεωρήσουμε χωρικές μεταβολές, δηλαδή όταν $T = T(x, t)$.

Το συμπέρασμα είναι ότι η θεώρηση θερμικών μεταβολών όσων αφορά το γεωγραφικό πλάτος της Γης δεν παίζει σημαντικό ρόλο στην ανταλλαγή θερμότητας Γης Ηλίου. Επομένως μπορούμε να θεωρήσουμε τη Γη σαν ένα θερμικά λεπτό σώμα.

Παρόμοια συμπεράσματα προκύπτουν αν λάβουμε υπόψιν τη καμπυλότητα της Γης, μεταβολές όσων αφορά το γεωγραφικό πλάτος κτλ.

2.1.4 Θερμικές μεταβολές λόγω του φαινομένου του θερμοκηπίου

Γνωρίζοντας την επίδραση της περιοδικής θέρμανσης στη Γη θέλουμε να δούμε πως μια αλλαγή στη μέση εισροή θερμότητας επιδρά στην επιφανειακή θερμοκρασία της Γης.

Λόγω των αερίων του θερμοκηπίου έχουμε επιπλέον θερμότητα που συσσωρεύεται στην ατμόσφαιρα. Θεωρούμε λοιπόν μια αλλαγή, αύξηση στη θερμική εισροή από Q σε $Q + q$. Το μοντέλο που θα αναλύσουμε είναι σχετικά απλό και δίνει μόνο μια ένδειξη για την αντίδραση της Γης σε μια τέτοιου είδους μεταβολή. Θεωρούμε τη Γη σαν ένα αγωγίμο στερεό. Ένα πιο ρεαλιστικό μοντέλο θα θεωρούσε τη Γη σαν ένα ομοιογενές ρευστό στρώμα που οι θερμικές ιδιότητες του είναι η μέση τιμή αυτών του εδάφους, της ατμόσφαιρας, των ωκεανών κτλ.

Σε κατάσταση ισορροπίας η εισροή θερμότητας Q εξισορροπείται από την εκροή θερμότητας κατά τη διάρκεια της νύχτας. Σε αυτή τη περίπτωση ισχύει ο νόμος του Stefan για την ακτινοβολία

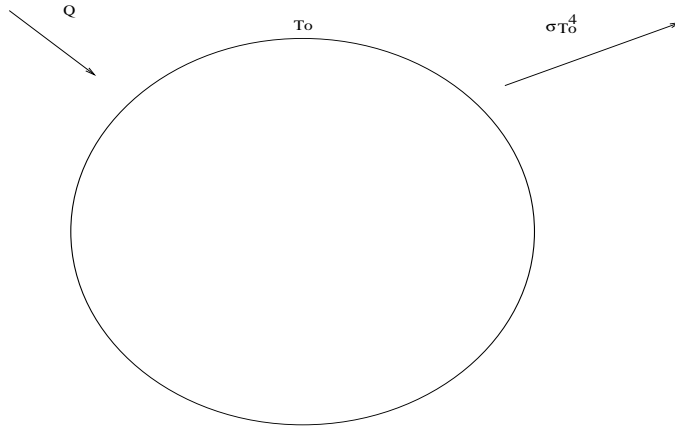
$$Q = \sigma T_0^4,$$

όπου Q είναι η θερμότητα του σώματος T_0 η θερμοκρασία του και σ σταθερά.

Εάν αυτή η ισορροπία διαταραχθεί και η εισροή θερμότητας γίνει $Q + q$ από την αρχή διατήρησης της ενέργειας παίρνουμε

$$\phi(0, t) = -kT_x(0, t) = Q + q - \sigma (T_0 + T(0, t))^4,$$

δηλαδή η επιφανειακή θερμοκρασία μεταβάλλεται και από T_0 αυξάνεται (για $q > 0$) σταδιακά κατά $T(0, t)$ με τέτοιο τρόπο ώστε το σύστημα να επανέλθει σε κατάσταση ισορροπίας, δηλαδή ώστε να ισχύει $Q + q = \sigma (T_0 + T(0, t))^4$ ή $T_x(0, t) = 0$.



Σχήμα 2.3: Εισροή και εκκροή θερμότητας στην επιφάνεια της Γής.

Θα υποθέσουμε, και αυτό είναι ρεαλιστικό, ότι η αλλαγή στην εισροή θερμότητας είναι σχετικά μικρή, δηλαδή ότι $\frac{q}{Q} \ll 1$ και κατά συνέπεια περιμένουμε να έχουμε $\frac{T(0,t)}{T_0} \ll 1$.

Έχουμε ότι

$$\begin{aligned} -kT_x(0,t) &= Q + q - \sigma(T_0 + T(0,t))^4 = Q + q - \sigma T_0^4 \left(1 + \frac{T(0,t)}{T_0}\right)^4 \\ &= Q + q - \sigma T_0^4 \left(1 + 4\frac{T(0,t)}{T_0} + 12\left(\frac{T(0,t)}{T_0}\right)^2 + \dots\right). \end{aligned}$$

Κρατώντας τους όρους κυρίαρχης τάξης στη παραπάνω σχέση και δεδομένου ότι $Q = \sigma T_0^4$, παίρνουμε

$$\begin{aligned} -kT_x(0,t) &= Q + q - \sigma T_0^4 - 4\frac{T(0,t)}{T_0} + \dots \\ &= q - 4\sigma T_0^4 \frac{T(0,t)}{T_0} + \dots \\ &= 4\frac{Q}{T_0} \left(\frac{qT_0}{4Q} - T(0,t)\right). \end{aligned}$$

Οπότε τελικά έχουμε τη σχέση

$$-kT_x(0,t) = 4\frac{Q}{T_0} \left(\frac{qT_0}{4Q} - T(0,t)\right),$$

ή για $\beta = \frac{4Q}{T_0}$ και $T_{eq} = \frac{T_0 q}{4Q}$ έχουμε

$$-kT_x(0,t) = \beta (T_{eq} - T(0,t)). \quad (2.3)$$

Η σχέση (2.3) είναι ο νόμος ψύξης του Newton. Η θερμοκρασία $T(0,t)$ θα αυξάνεται μέχρι να γίνει ίση με T_{eq} δηλαδή τη θερμοκρασία του σώματος στη καινούρια κατάσταση ισορροπίας.

Το ζητούμενο είναι ο χρόνος που χρειάζεται η επιφανειακή θερμοκρασία της Γης για να πάρει τη τιμή $T_0 + T_{eq}$. Για $T_0 = 290^\circ K$, $\frac{q}{Q} = 4\%$ έχουμε μια αύξηση στη μέση θερμοκρασία της Γης $T_{eq} = \frac{T_0}{4} \frac{q}{Q} \simeq 2.9^\circ K$. Για να προσδιορίσουμε τη χρονική κλίμακα στην οποία θα γίνει αυτή η αλλαγή χρησιμοποιούμε το ακόλουθο αποτέλεσμα. Συγκεκριμένα θεωρούμε το ίδιο μοντέλο που κατασκευάσαμε για να μελετήσουμε τις προσωρινές θερμοκρασιακές μεταβολές της Γης, δηλαδή $T_t = kT_{xx}$, $0 < x < \infty$, $\lim_{x \rightarrow \infty} T(x, t) = 0$, αλλά με συνοριακή συνθήκη για $x = 0$ $-kT_x(0, t) = Q'$. Σε αυτή τη περίπτωση μπορεί να δειχθεί ότι η θερμοκρασία για $x = 0$ ικανοποιεί την εξίσωση :

$$T(0, t) = 2\mu \int_0^t \frac{Q'}{\sqrt{t-t'}} dt', \quad (2.4)$$

με $\mu = \frac{1}{2\sqrt{\pi\rho cK}}$. Άρα για $Q' = \beta(T_{eq} - T(0, t))$ έχουμε

$$T(0, t) = 2\mu\beta \int_0^t \frac{T_{eq} - T(0, t')}{\sqrt{t-t'}} dt'. \quad (2.5)$$

Αυτή είναι μια ολοκληρωτική εξίσωση Voltera με άγνωστο τη συνάρτηση $T(0, t)$. Υπάρχει θεώρημα που μας εξασφαλίζει την ύπαρξη και τη μοναδικότητα της λύσης για την εξίσωση (2.5).

Επίσης η μέθοδος αυτή με την οποία ένα πρόβλημα μερικών διαφορικών εξισώσεων μετασχηματίζεται σε μια ολοκληρωτική εξίσωση στο σύνορο (μειώνοντας τη διάσταση του προβλήματος κατά ένα και απλοποιώντας το πρόβλημα) ονομάζεται Boundary integral method.

Η κλίμακα χρόνου που χρειάζεται η $T(0, t)$ για να γίνει ίση με την T_{eq} μπορεί να προσδιοριστεί από την εξίσωση (2.5). Για να το κάνουμε αυτό εφαρμόζουμε την αλλαγή κλίμακας $\theta = \frac{T}{T_{eq}}$, $\tau = \frac{t}{t_0}$, όπου το t_0 είναι η χρονική κλίμακα που θέλουμε να προσδιορίσουμε. Η εξίσωση (2.5) ως προς τις καινούριες μεταβλητές παίρνει τη μορφή

$$\theta(0, \tau) = 2 \frac{\mu\beta}{\sqrt{t_0}} \int_0^\tau \frac{1 - \theta(0, \tau')}{\sqrt{\tau - \tau'}} d\tau'. \quad (2.6)$$

Άρα μια χρονική κλίμακα τέτοια ώστε να ανταποκρίνεται σε αισθητές μεταβολές της $\theta(0, \tau)$ στην εξίσωση (2.6) πρέπει να ικανοποιεί τη σχέση $2 \frac{\mu\beta}{\sqrt{t_0}} = 1$ ή $t_0 = \frac{4\pi\rho cK}{\sqrt{t_0}} = \frac{\pi k}{\beta^2} = \frac{\pi}{k} \left(\frac{k}{\beta}\right)^2$. Για $t_0 = 290^\circ K$, $\frac{q}{Q} = 4\%$, $T_{eq} = 2.9^\circ K$ και ότι $k = 0.34 \text{ kw}/(\text{m}^2/\text{sec})$, (ο ρυθμός με τον οποίο η θερμότητα διαπερνά τα σύννεφα) έχουμε $t_0 \sim 11$ ημέρες.

Πιο ακριβή μοντέλα που λαμβάνουν υπόψιν τη θερμοχωρητικότητα της ατμόσφαιρας κτλ. δίνουν $t_0 \sim 1$ χρόνο.

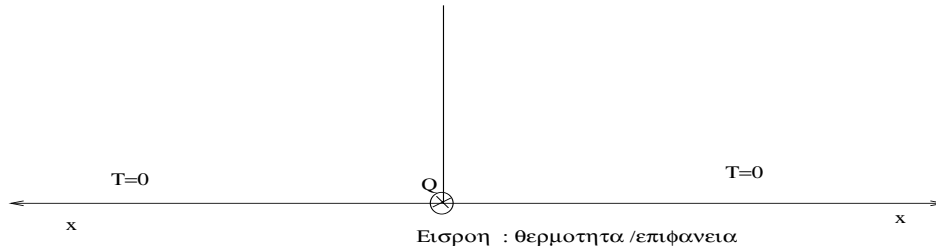
Ακόμα πιο πολύπλοκα και ακριβή μοντέλα δείχνουν ότι αυτός ο χαρακτηριστικός χρόνος είναι ακόμα πιο μεγάλος και ότι η επίδραση από το φαινόμενο του θερμοκηπίου δεν έχει γίνει αισθητή ακόμα.

2.1.5 Θεμελιώδης λύση για τη εξίσωση της θερμότητας

Θεωρούμε ανά πεπερασμένο ποσό θερμότητας ανά μοναδιαία επιφάνεια το οποίο στιγμιαία μεταφέρεται σε μια επίπεδη επιφάνεια ενός αγωγίμου υλικού. Η βασική ιδέα είναι ότι αν προσδιορίσουμε τη κατανομή της θερμοκρασίας λόγω στιγμιαίας εισροής θερμότητας σε ένα σημείο του χώρου μπορούμε να υπολογίσουμε τη κατανομή της θερμοκρασίας λόγω οποιασδήποτε εισροής θερμότητας σε κάποιο σημείο σε οποιοδήποτε χρόνο απλά προσθέτοντας τις συνεισφορές από τέτοιες πηγές στο χώρο και το χρόνο.

Θεωρούμε ότι έχουμε τη θερμική πηγή στο σημείο $x = 0, t = 0$ ποσότητας Q ανά μονάδα επιφανείας. Αν $T(x, t)$ είναι η θερμοκρασία, αυτή ικανοποιεί το εξής πρόβλημα

$$\begin{aligned} T_t(x, t) &= kT_{xx}, & -\infty < x < \infty, & \quad t > 0, \\ T(x, 0) &= 0, & x \neq 0, \\ \lim_{x \rightarrow \pm\infty} T(x, t) &= 0, \\ \int_{-\infty}^{\infty} T(x, t) dx &= Q' = \frac{Q}{\rho c}. \end{aligned}$$



Σχήμα 2.4: Σημιακή εισροή θερμότητας

Οι παράμετροι του προβλήματος είναι οι ποσότητες x, t, k, Q' και T άρα η λύση θα είναι της μορφής $T = T(x, t, k, Q')$. Χρησιμοποιώντας διαστατική ανάλυση μπορούμε να καταλήξουμε στο συμπέρασμα ότι $T = \frac{Q'}{\sqrt{kt}} U(\xi)$, με $\xi = \frac{x}{\sqrt{kt}}$. Αυτό το αποτέλεσμα μας δείχνει ότι ένας μετασχηματισμός κατάλληλος για το πρόβλημα είναι ο εξής $(T, x, t) \rightarrow (U, \xi, t)$. Έτσι μπορούμε να πάρουμε ένα πρόβλημα ως προς τη $U = U(\xi)$ δηλαδή μια συνήθη διαφορική εξίσωση αντί μιας μερικής διαφορικής. Η μεταβλητή $\xi = \frac{x}{\sqrt{kt}}$ ονομάζεται μεταβλητή ομοιότητας (similarity variable) και η αντίστοιχη λύση ομοιότητας (similarity solution), επειδή ομοιότητα της λύσης για διάφορες χρονικές στιγμές. Αν πχ. T_0 η θερμοκρασία για

$x = x_0, t = t_0$ δηλαδή $\xi_0 = \frac{x_0}{\sqrt{kt_0}}$ τότε για $t = 4t_0, x = 2x_0$ έχουμε $\xi = \frac{x}{\sqrt{kt}} = \xi_0$ και $T(2x_0, 4t_0) = \frac{T_0}{2}$.

Αυτός ο μετασχηματισμός μπορεί να προσδιοριστεί και αν αναζητήσουμε ένα μετασχηματισμό που αφήνει την εξίσωση αναλλοίωτη. Συγκεκριμένα αν $\bar{T}(\bar{x}, \bar{t}) = \gamma T(x, t), \bar{x} = \alpha x, \bar{t} = \beta t$ έχουμε

$$\begin{aligned}\bar{T}_t(\bar{x}, \bar{t}) &= k \frac{\alpha^2}{\beta} \bar{T}_{\bar{x}\bar{x}}, \quad -\infty < \bar{x} < \infty, \quad \bar{t} > 0, \\ \bar{T}(\bar{x}, 0) &= 0, \quad \bar{x} \neq 0, \\ \lim_{\bar{x} \rightarrow \pm\infty} \bar{T}(\bar{x}, \bar{t}) &= 0, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \bar{T}(\bar{x}, \bar{t}) d\bar{x} &= \alpha\gamma Q'.\end{aligned}\tag{2.7}$$

Για να παραμείνει αναλλοίωτη η εξίσωση πρέπει $\bar{T} = \frac{1}{\sqrt{\beta}}, \bar{x} = \sqrt{\beta}x, \bar{t} = \beta t$, επειδή θέλουμε $\alpha^2 = \beta$ και $\alpha\gamma = 1$. Άρα $\beta = \left(\frac{x}{\bar{x}}\right)^2 = \frac{\bar{t}}{t} = \left(\frac{\bar{T}}{T}\right)^{-2}$. Επομένως καταλήγουμε πάλι στο συμπέρασμα ότι $T(x, t) = \frac{1}{\sqrt{t}} F\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\right)$.

Θέτοντας $\xi = \frac{x}{\sqrt{kt}}$ έχουμε

$$T_t(x, t) = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial \xi(x, t)}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \left(\frac{Q'}{\sqrt{kt}} U(\xi) \right),$$

ή

$$T_t(x, t) = -\frac{Q'}{2t\sqrt{kt}} (U(\xi) + \xi U'(\xi)).$$

Όμοια

$$T_{xx}(x, t) = \frac{Q'}{(kt)^{\frac{3}{2}}} U''(\xi).$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση έχουμε

$$U''(\xi) + \frac{\xi}{2} U'(\xi) + \frac{1}{2} U(\xi) = 0,$$

ενώ

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(\xi) d\xi = 1, \quad \lim_{\xi \rightarrow \pm\infty} U(\xi) = 0.$$

Επίσης λόγω συμμετρίας ως προς τον άξονα $x = 0$ το πρόβλημα μπορεί να απλοποιηθεί

$$U''(\xi) + \frac{\xi}{2} U'(\xi) + \frac{1}{2} U(\xi) = 0,\tag{2.8}$$

$$\int_0^{\infty} U(\xi) d\xi = \frac{1}{2}, \quad U'(0) = 0, \quad \lim_{\xi \rightarrow \infty} U(\xi) = 0.$$

Οι δύο γραμμικά ανεξάρτητες λύσεις της εξίσωσης είναι

$$U_1(\xi) = C_1 e^{-\frac{\xi^2}{4}}, \quad U_2(\xi) = C_2 e^{-\frac{\xi^2}{4}} \int_0^{\xi} e^{\frac{y^2}{4}} dy.$$

Επειδή $U_2'(\xi) \neq 0$ συμπεραίνουμε ότι

$$U(\xi) = Ce^{-\frac{\xi^2}{4}}.$$

Επίσης από τη συνθήκη $\int_0^\infty U(\xi)d\xi = \frac{1}{2}$ παίρνουμε $C = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$, και τελικά

$$U(\xi) = \frac{e^{-\frac{\xi^2}{4}}}{2\sqrt{\pi}},$$

ή

$$T(x, t) = \frac{Q'}{2\sqrt{\pi kt}} e^{-\frac{x^2}{4kt}}.$$

Επιπλέον

$$T(0, t) = \frac{Q'}{2\sqrt{\pi kt}}.$$

Συμβολίζουμε τη κατανομή θερμοκρασίας λόγω εισροής θερμότητας, μοναδιαίας ανα μονάδα επιφάνειας για $x = 0$, $t = 0$ ως εξής

$$G(x, t) = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ \mu \frac{e^{-\frac{x^2}{4kt}}}{\sqrt{t}} & t > 0, \end{cases}$$

όπου $\mu = \frac{1}{2\rho c\sqrt{\pi k}} = \frac{1}{2\sqrt{\pi\rho cK}}$, για $k = \frac{K}{\rho c}$.

Επειδή η εξίσωση της θερμότητας είναι αναλλοίωτη στην αλλαγή της αρχής ($t = 0$, $x = 0$) για $x = 0$ λόγω εισροής θερμότητας ανά μοναδιαία επιφάνεια, η κατανομή θερμοκρασίας που οφείλεται σε ένα ποσό θερμότητας $q(t')dt'$ ανά μοναδιαία επιφάνεια σε ένα στοιχειώδες χρονικό διάστημα (t' , $t' + dt'$) στο $x = 0$ δίνεται από τη σχέση

$$dT(0, t) = [q(t')dt']G(0, t - t'),$$

ή

$$dT(0, t) = \begin{cases} 0, & t < t', \\ \mu \frac{q(t')dt'}{\sqrt{t-t'}} & t > t', \end{cases}$$

Για διαδοχικές εισροές ποσών θερμότητας έχουμε

$$T(0, t) = \mu \int_0^t \frac{q(t')}{\sqrt{t-t'}} dt',$$

και

$$T(x, t) = \mu \int_0^t \frac{q(t')e^{-\frac{x^2}{4k(t-t')}}}{\sqrt{t-t'}} dt'.$$

Αν θέλουμε να μελετήσουμε το ίδιο πρόβλημα για $x > 0$ μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τη συμμετρία του προβλήματος. Η συνάρτηση $G(x, t)$ είναι συμμετρική ως προς το $x = 0$. Θεωρούμε ότι $2G(x, t)$ είναι η κατανομή θερμοκρασίας σε ένα μονωμένο στο $x = 0$ διάστημα $[0, \infty)$, λόγω μοναδιαίας εισροής θερμότητας ανά μονάδα επιφάνειας για $t = 0$. Άρα για $x = 0$

$$T(0, t) = 2\mu \int_0^t \frac{q(t')}{\sqrt{t-t'}} dt'.$$

Παρατήρηση Η λύση ομοιότητας για την εξίσωση (2.7) μπορεί να βρεθεί και ως εξής :

Αναζητούμε λύσεις της μορφής $T = t^b U(\xi)$ όπου $\xi = \frac{x}{t^a}$, όπου τα a, b θα προσδιοριστούν. Αντικαθιστώντας στην (2.7) παίρνουμε

$$bt^{b-1}U(\xi) + t^b(-axt^{-a})U'(\xi) = kt^{b-2a}U''(\xi),$$

ή

$$t^{b-1}(bU(\xi) - a\xi U'(\xi)) = kt^{b-2a}U''(\xi),$$

ή τελικά

$$t^{2a-1}(bU(\xi) - a\xi U'(\xi)) = kU''(\xi).$$

Σε αυτή την εξίσωση δεν θέλουμε εξάρτηση από το t επομένως επιλέγουμε $a = \frac{1}{2}$ και $T = t^b U(\frac{x}{\sqrt{t}})$, ενώ η εξίσωση γίνεται

$$kU''(\xi) + \frac{1}{2}\xi U'(\xi) - bU(\xi) = 0.$$

Επίσης θέλουμε $\int_{-\infty}^{\infty} T(x, t) dx = Q'$ ή

$$\int_{-\infty}^{\infty} t^b \sqrt{t} U(\frac{x}{\sqrt{t}}) d\xi = Q',$$

για $dx = \sqrt{t} d\xi$. Όμοια με πριν δε θέλουμε να έχουμε εξάρτηση από το x και το t και πρέπει να επιλέξουμε $b = -\frac{1}{2}$ και τελικά $T(x, t) = \frac{1}{\sqrt{t}} U(\frac{x}{\sqrt{t}})$, οπότε καταλήγουμε πάλι στην εξίσωση (2.8).

Η μέθοδος αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί γενικά για την εύρεση λύσης ομοιότητας σε μερικές διαφορικές εξισώσεις, αν το πρόβλημα επιδέχεται τέτοια λύση.

2.1.6 Ο κύκλος του άνθρακα στην ατμόσφαιρα Carbon Box Model

Για τη παραγωγή ενός πιο ακριβούς μοντέλου σχετικά με το φαινόμενο του θερμοκηπίου χρειαζόμαστε ένα μοντέλο που θα προσδιορίζει τη συγκέντρωση του διοξειδίου του άνθρακα CO_2 . Το CO_2 είναι το πιο σημαντικό από τα αέρια του θερμοκηπίου και για αυτό θα μελετήσουμε το κύκλο του. Για τα υπόλοιπα αέρια του θερμοκηπίου CH_4 , N_2O , O_3 , $CFCl_3$, CF_2Cl_2 μπορούν να παραχθούν παρόμοια μοντέλα.

Προσδιορίζοντας τη συγκέντρωση του CO_2 στην ατμόσφαιρα μπορούμε να έχουμε μια εκτίμηση για την αύξηση της θερμοκρασίας, q που εγκλωβίζεται στην ατμόσφαιρα, και με μεγαλύτερη ακρίβεια να υπολογίσουμε την επιφανειακή θερμοκρασία της Γης, $T(0, t)$.

Σύμφωνα με αυτό το μοντέλο θεωρούμε ότι η Γη χωρίζεται σε διάφορες συνιστώσες (Ατμόσφαιρα, Έμβια Γης, Έδαφος και βλάστηση, θερμά επιφανειακά ύδατα, κρύα επιφανειακά ύδατα, έμβια θερμών επιφανειακών υδάτων, έμβια κρύων επιφανειακών υδάτων, και ύδατα ενδιάμεσου ή μεγάλου βάθους). Ανάμεσα σε αυτές τις συνιστώσες θεωρούμε ότι υπάρχει ροή άνθρακα ή των ενώσεων του, κυρίως CO_2 . Οι συνιστώσες αυτές σχηματικά αναπαριστώνται από κιβώτια και οι ροές ανάμεσα τους με βέλη που δείχνουν τη κατεύθυνση της ροής του άνθρακα. Οι ροές αυτές κατά βάση είναι χημικές αντιδράσεις πρώτης τάξης αλλά όσων αφορά την αναπνοή έμβιων όντων της Γης ή τη φωτοσύνθεση είναι αντιδράσεις τύπου Michaelis - Menton. Συνολικά έχουμε 8 συνιστώσες και 19 ροές και θα θεωρήσουμε και μια επιπλέον ροή προς το κιβώτιο που αναπαριστά την ατμόσφαιρα, ιδιαίτερα κρίσιμη, αυτή που αντιπροσωπεύει τις ανθρωπογενείς εκπομπές. Η μεταβολή αυτής της ροής είναι αυτή που θα αναδείξει τη πιθανή απόκλιση του συστήματος από τη φυσική του ισορροπία λόγω της μόλυνσης του περιβάλλοντος που προκαλείται από τον άνθρωπο.

Πιο συγκεκριμένα οι εξισώσεις του μοντέλου παράγονται ως εξής.

Η εξίσωση για την περιεκτικότητα του άνθρακα στα έμβια της Γης

Έχουμε, ότι αν C_2 η περιεκτικότητα του άνθρακα στα έμβια όντα της γης (σε μονάδες μάζας ανά επιφάνεια), τότε η μεταβολή του άνθρακα είναι ανάλογη της απορρόφησης άνθρακα λόγω φωτοσύνθεσης, της αναπνοής των έμβιων όντων, της μεταφοράς άνθρακα στο έδαφος λόγω αποσύνθεσης, και της αποδάσωσης.

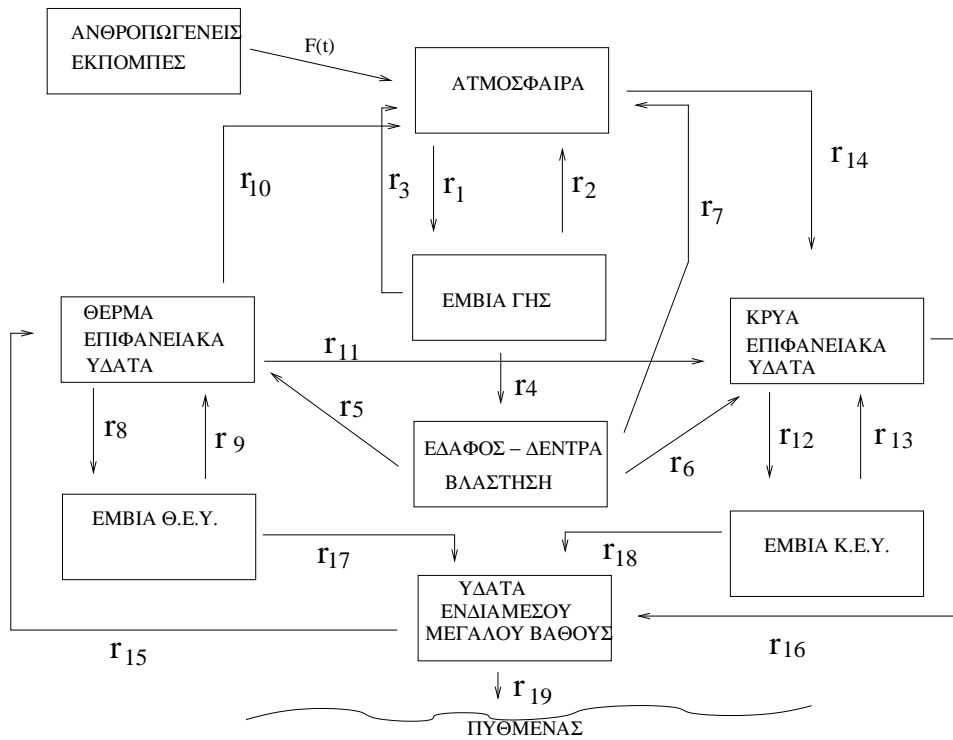
Συγκεκριμένα έχουμε

$$A_2 \frac{dC_2}{dt}(t) = \left(k_p \frac{C_1(t)}{K_M + C_1(t)} C_2(t) A_2 \theta_p^{\Delta T} \right) - \left(k_{br} \frac{C_1(t)}{K_M + C_1(t)} C_2(t) A_2 \theta_{br}^{\Delta T} \right) - \left(k_e \frac{C_1(t)}{K_M + C_1(t)} C_2(t) A_2 \right) - D(t),$$

όπου

A_2 : επιφάνεια γης ($[A_2] = L^2$, L μονάδα μήκους).

k_p : σταθερά μέγιστου ρυθμού φωτοσύνθεσης ($[k_p] = T$, T μονάδα χρόνου),



Σχήμα 2.5: Σχηματική αναπαράσταση του μοντέλου

k_M : ταχύτητα μέσου κορεσμού, ($[k_M] = ML$, M μονάδα μάζας),
 θ_p : αδιάστατη σταθερά εξάρτησης από θερμοκρασία,
 ΔT : μεταβολή μέσης θερμοκρασίας γης από τη στάσιμη κατάσταση δηλαδή τη Προβιομηχανική Εποχή, ($[\Delta T] = \Theta$, Θ μονάδες θερμοκρασίας),
 k_{br} : σταθερά αναπνοής έμβιων γης, ($[k_{br}] = T^{-1}$),
 θ_{br} : αδιάστατη σταθερά,
 $D(t)$: ρυθμός αποδάσωσης ($[D(t)] = MT^{-1}$),
 k_e : σταθερά αποσύνθεσης, ($[k_e] = T^{-1}$),
 C_1 : η συγκέντρωση του άνθρακα στην ατμόσφαιρα ($[C_1] = ML^{-3}$).

Η ροή $r_1 = k_p \frac{C_1(t)}{K_M + C_1(t)} C_2(t) A_2 \theta_p^{\Delta T}$, σχετίζεται με τη φωτοσύνθεση, ακολουθεί την αντίδραση Michaelis-Menton, με εξάρτηση από τη θερμοκρασία ($\theta_p^{\Delta T}$). Ανάλογη μορφή έχει και η ροή $r_2 = k_{br} \frac{C_1(t)}{K_M + C_1(t)} C_2(t) A_2 \theta_{br}^{\Delta T}$, που σχετίζεται

με την αναπνοή έμβιων όντων πάνω στη γη. Η ροή $r_4 = k_e \frac{C_1(t)}{K_M + C_1(t)} C_2(t) A_2$ σχετίζεται με τη μεταφορά άνθρακα στο έδαφος λόγω αποσύνθεσης και τέλος η ροή $r_3 = D(t)$ έχει να κάνει με τη μείωση άνθρακα στα έμβια της γης λόγω αποδόσωσης.

Η εξίσωση για την περιεκτικότητα του άνθρακα στο έδαφος της Γης

Εάν C_3 είναι η περιεκτικότητα του άνθρακα στα έδαφος της γης ($[C_3] = ML^{-3}$), τότε αυτή μεταβάλλεται ανάλογα με την αναπνοή μικροοργανισμών και τη διαφυγή άνθρακα από το έδαφος προς τα Θερμά Επιφανειακά Ύδατα και τα Κρύα Επιφανειακά Ύδατα.

Συγκεκριμένα έχουμε

$$V_3 \frac{dC_3}{dt}(t) = \left(k_e \frac{C_1(t)}{K_M + C_1(t)} C_2(t) A_2 \right) - (k_{sr} C_3(t) V_3 \theta_{sr}^{\Delta t}) - (k_w C_3(t) V_3),$$

όπου

V_3 : συγκέντρωση του CO_2 στο έδαφος ($[V_3] = L^3$),

k_{sr} : σταθερά ρυθμού αναπνοής έμβιων (πχ. μικροοργανισμών) στο έδαφος ($[k_{sr}] = T^{-1}$),

k_w : σταθερά διαφυγής άνθρακα προς τους ωκεανούς ($[k_w] = T^{-1}$),

θ_{sr} : αδιάστατη σταθερά.

Η ροή $r_7 = k_{sr} C_3(t) V_3 \theta_{sr}^{\Delta t}$ σχετίζεται με τη διαδικασία αναπνοής μικροοργανισμών, ενώ οι ροές r_5 και r_6 , $r_5 + r_6 = k_w C_3(t) V_3$ σχετίζονται με τη διαφυγή άνθρακα από το έδαφος προς τα ΘΕΥ, κατά τα $\frac{2}{3}$, και προς τα ΚΕΥ, κατά το $\frac{1}{3}$.

Η εξίσωση για την περιεκτικότητα του άνθρακα στα θερμά επιφανειακά ύδατα (ΘΕΥ)

Θερμά επιφανειακά ύδατα μπορούν να θεωρηθούν οι ωκεανοί στη τροπική και εύκρατη ζώνη. Εάν C_4 είναι η περιεκτικότητα άνθρακα στα θερμά επιφανειακά ύδατα ($[C_4] = ML^{-3}$), τότε αυτή μεταβάλλεται λόγω της διαφυγής άνθρακα στην ατμόσφαιρα, την κίνηση υδάτων από τα θερμά επιφανειακά ύδατα προς τα Κρύα επιφανειακά ύδατα και από τα κρύα επιφανειακά ύδατα στα ύδατα μέσω επιφανειακού βάλτους λόγω της διαφοράς θερμοκρασίας, τη διαδικασία αναπνοής, της φωτοσύνθεσης και αποσύνθεσης έμβιων στα θερμά επιφανειακά ύδατα.

Συγκεκριμένα έχουμε

$$\begin{aligned} V_4 \frac{dC_4}{dt}(t) &= - (k_l S_{wo} (P_{wo} - P_{atm}) A_4) - (k_{pwo} C_4(t) V_5) + (k_{rwo} C_5(t) V_5) \\ &+ (k_{up} C_8(t) A_4) - (Q_{46} C_4(4)) + \frac{2}{3} (k_w C_3(t) V_3), \end{aligned}$$

Εδώ

V_4 : ο όγκος των θερμών επιφανειακών υδάτων ($[V_4] = L^3$),

V_5 : ο όγκος των έμβιων θερμών επιφανειακών υδάτων ($[V_5] = L^3$),

k_l : ταχύτητα μεταφοράς αέριας μάζας ($[k_l] = LT^{-1}$),

S_{wo} : διαλυτότητα στα θερμά επιφανειακά ύδατα ($[S_{wo}] = ML^{-3} ppm^{-1}$, ppm είναι μέρη ανα εκατομμύριο),

P_{wo} : μερική πίεση CO_2 στα θερμά επιφανειακά ύδατα ($[P_{wo}] = ppm$),

P_{atm} : μερική πίεση CO_2 στην ατμόσφαιρα ($[P_{atm}] = ppm$).

Η ροή $r_{10} = (k_l S_{wo} (P_{wo} - P_{atm}) A_4)$ σχετίζεται με τη διαφυγή άνθρακα στην ατμόσφαιρα και είναι ανάλογη της διαλυτότητας S_{wo} και της διαφοράς των μερικών πιέσεων $P_{wo} - P_{atm}$ του CO_2 στην ατμόσφαιρα και στους ωκεανούς. Επίσης στους ωκεανούς λόγω διαφοράς θερμοκρασίας έχουμε κίνηση υδάτων από τα θερμά επιφανειακά ύδατα προς τα κρύα επιφανειακά ύδατα όπως και από τα κρύα επιφανειακά ύδατα προς τα ύδατα ενδιάμεσου η μεγάλου βάρους και στη συνέχεια από τα ύδατα ενδιάμεσου η μεγάλου βάρους προς τα θερμά επιφανειακά ύδατα. Η ροές $r_{11} = Q_{46} C_4(4)$ και $r_{15} = k_{up} C_8(t) A_4$ σχετίζονται με αυτή τη διαδικασία. Στη περίπτωση αυτή

k_{up} : ταχύτητα ανόδου προς τα θερμά επιφανειακά ύδατα ($[k_{up}] = LT^{-1}$),

A_4 : επιφάνεια των θερμών επιφανειακών υδάτων ($[A_4] = L^2$),

Q_{46} : ταχύτητα κίνησης υδάτων από τα θερμά επιφανειακά ύδατα προς τα κρύα επιφανειακά ύδατα ($[k_l] = LT^{-1}$),

C_8 : συγκέντρωση άνθρακα στα ύδατα ενδιάμεσου η μεγάλου βάρους ($[C_8] = ML^{-3}$).

Επίσης λόγω των μηχανισμών της αναπνοής, της φωτοσύνθεσης και της αποσύνθεσης των έμβιων όντων στα θερμά επιφανειακά ύδατα έχουμε τις ροές $r_8 = k_{pwo} C_4(t) V_5$ και $r_9 = k_{rwo} C_5(t) V_5$, όπου

k_{pwo} : σταθερά αναλογίας κατανάλωσης άνθρακα από τα έμβια όντα στα θερμά επιφανειακά ύδατα ($[k_{pwo}] = T^{-1}$),

k_{rwo} : σταθερά αναλογίας του μηχανισμού αναπνοής ($[k_{rwo}] = T^{-1}$).

Η εξίσωση για την περιεκτικότητα του άνθρακα στα κρύα επιφανειακά ύδατα (ΚΕΥ) Κρύα επιφανειακά ύδατα μπορούν να θεωρηθούν οι ωκεανοί στην ανταρκτική και στην Γροιλανδία. Συμβολίζουμε με C_6 τη συγκέντρωση άνθρακα στα κρύα επιφανειακά ύδατα ($[C_6] = ML^{-3}$). Η μεταβολή της συγκέντρωσης σχετίζεται με την ανταλλαγή άνθρακα λόγω αναπνοής, παραγωγής έμβιων στα κρύα επιφανειακά ύδατα και με την κάθοδο υδάτων προς μεγαλύτερα βάθη. Η εξίσωση για το C_6 θα έχει τη μορφή

$$\begin{aligned} V_6 \frac{dC_6}{dt}(t) &= (k_l S_{wo} (P_{atm} - P_{co}) A_4) - (k_{pwo} C_6(t) V_7) \\ &+ (k_{rco} C_7(t) V_7) - (k_{dc} C_6(t) V_6) \\ &+ (Q_{46} C_4(4)) + \frac{1}{3} (k_w C_3(t) V_3), \end{aligned}$$

όπου

V_6 : ο όγκος των κρύων επιφανειακών υδάτων ($[V_6] = L^3$),

V_7 : ο όγκος των έμβιων κρύων επιφανειακών υδάτων ($[V_7] = L^3$),

S_{co} : διαλυτότητα στα κρύα επιφανειακά ύδατα ($[S_{co}] = ML^{-3} ppm^{-1}$),

P_{wo} : μερική πίεση CO_2 στα κρύα επιφανειακά ύδατα ($[P_{co}] = ppm$),

k_{pco} : σταθερά αναλογίας κατανάλωσης άνθρακα από τα έμβια όντα στα κρύα επιφανειακά ύδατα ($[k_{pwo}] = T^{-1}$),

k_{rco} : σταθερά αναλογίας του μηχανισμού αναπνοής ($[k_{rco}] = T^{-1}$),

C_7 : συγκέντρωση CO_2 των έμβιων κρύων επιφανειακών υδάτων ($[C_7] = ML^{-3}$),
 k_{dc} : ταχύτητα καθόδου υδάτων ($[k_{up}] = LT^{-1}$),
 A_6 : η επιφάνεια των κρύων επιφανειακών υδάτων ($[A_6] = L^3$).

Η ροή $r_{14} = k_l S_{wo}(P_{atm} - P_{wo})A_4$ σχετίζεται με την εισροή CO_2 στους ωκεανούς λόγω της διαφοράς μερικών πιέσεων $P_{co} - P_{atm}$. Οι ροές $r_{12} = k_{pwo}C_6(t)V_7$ και $r_{13} = k_{rco}C_7(t)V_7$ σχετίζονται με την ανταλλαγή άνθρακα λόγω αναπνοής και παραγωγής έμβιων στα κρύα επιφανειακά ύδατα. Επίσης η ροή $r_{16} = k_{dc}C_6(t)V_6$ σχετίζεται με τη κάθοδο των υδάτων προς μεγαλύτερα βάθη.

Η εξίσωση για την περιεκτικότητα του άνθρακα στα έμβια θερμών επιφανειακών υδάτων Η μεταβολή της συγκέντρωσης στα έμβια θερμών επιφανειακών υδάτων, dC_5/dt ικανοποιεί την εξίσωση

$$V_5 \frac{dC_5}{dt}(t) = (k_{pwo}C_4(t)V_5) - (k_{rwo}C_5(t)V_5) - (k_{swo}C_5(t)A_4),$$

όπου

k_{swo} : σταθερά αναλογίας βύθισης έμβιων ($[k_{swo}] = LT^{-1}$),

Η ροή $r_{17} = k_{swo}C_5(t)A_4$ σχετίζεται με την κάθοδο άνθρακα λόγω αποσύνθεσης έμβιων όντων σε ύδατα μέσου ή μεγάλου επιφανειακού βάρους.

Η εξίσωση για την περιεκτικότητα του άνθρακα στα έμβια κρύων επιφανειακών υδάτων Στη περίπτωση αυτή η εξίσωση για το C_7 έχει τη μορφή

$$V_7 \frac{dC_7}{dt}(t) = (k_{pco}C_6(t)V_7) - (k_{rco}C_7(t)V_7) - (k_{sco}C_7(t)V_7),$$

όπου

k_{sco} : σταθερά αναλογίας βύθισης έμβιων ($[k_{sco}] = LT^{-1}$).

Η ροή $r_{18} = k_{sco}C_7(t)V_7$ σχετίζεται με την αποσύνθεση - βύθιση έμβιων σε ύδατα μεγάλου βάρους.

Η εξίσωση για την περιεκτικότητα του άνθρακα στα ύδατα ενδιάμεσου ή μεγάλου βάρους Στη περίπτωση αυτή η εξίσωση για το C_8 έχει τη μορφή

$$V_8 \frac{dC_8}{dt}(t) = (k_{dc}C_6(t)A_6) - (k_{up}C_8(t)A_4) + (k_{swo}C_5(t)A_4) + (k_{sco}C_7(t)A_6) - (k_{sed}C_8(t)A_8),$$

όπου

V_8 : ο όγκος υδάτων ενδιάμεσου ή μεγάλου βάρους ($[V_8] = L^3$),

A_8 : επιφάνεια υδάτων ενδιάμεσου ή μεγάλου βάρους ($[A_8] = L^2$),

k_{sed} : σταθερά αναλογίας απόθεσης άνθρακα στον πυθμένα ($[k_{sed}] = T^{-1}$).

Η ροή $r_{19} = k_{sed}C_8(t)A_8$ σχετίζεται με την απόθεση άνθρακα στο πυθμένα των ωκεανών.

Η εξίσωση για την περιεκτικότητα του άνθρακα στην ατμόσφαιρα Η εξίσωση για το C_1 έχει τη μορφή

$$\begin{aligned} V_1 \frac{dC_1}{dt}(t) = & F(t) + D(t) - \left(k_p \frac{C_1(t)}{K_M + C_1(t)} C_2(t) A_2 \theta_p^{\Delta T} \right) \\ & + \left(k_{br} \frac{C_1(t)}{K_M + C_1(t)} C_2(t) A_2 \theta_{br}^{\Delta T} \right) + (k_{sr} C_3(t) V_3 \theta_{sr}^{\Delta T}) \\ & + (k_p S_{wo} (P_{wo} - P_{atm}) A_4) - (k_l S_{co} (P_{atm} - P_{co}) A_6), \end{aligned}$$

Το σύστημα των εξισώσεων για τις μεταβλητές C_1 έως C_8 αποτελεί ένα σύστημα συνηθών διαφορικών εξισώσεων, μη γραμμικό λόγω των όρων της μορφής $\frac{C_1(t)}{K_M + C_1(t)}$ κτλ. που εμφανίζονται στις εξισώσεις για τα C_1, C_2, C_3 και μπορεί να λυθεί αριθμητικά πχ. με τη χρήση κάποιας μεθόδου Runge Kutta παίρνοντας τιμές για τις διάφορες σταθερές που εμφανίζονται στο μοντέλο από μετρήσεις που υπάρχουν στη σχετική βιβλιογραφία.

Για την επίλυση του συστήματος επίσης χρειάζονται οι αρχικές συνθήκες $C_i(t_i) = C_i^o$ οι οποίες μπορούν και αυτές να εκτιμηθούν και να θεωρηθούν γνωστές για μια χρονική στιγμή που ανταποκρίνεται στις απαρχές εμφάνισης του φαινομένου του θερμοκηπίου, πχ. θα μπορούσε $t_i = 1940$.

Όσον αφορά τη μεταβολή της θερμοκρασίας ΔT ιστορικά δεδομένα δείχνουν ότι η μέση θερμοκρασία της Γης είναι ανάλογη της συγκέντρωσης του CO_2 στην ατμόσφαιρα (του C_1). Θεωρώντας ότι στη προβιομηχανική εποχή η μέση θερμοκρασία της Γης ήταν $0.4^\circ C$ χαμηλότερη και ότι η συγκέντρωση CO_2 στην ατμόσφαιρα ήταν $280 ppm$ έχουμε τον ακόλουθο εμπειρικό νόμο

$$T(t) = -0.4 + \alpha [C_1(t) - 280], \quad (2.9)$$

όπου α σταθερά αναλογίας που δείχνει την αύξηση της θερμοκρασίας σε σχέση με την αύξηση του CO_2 . Εμπειρικά έχει υπολογιστεί ότι $\alpha \sim 0.01^\circ C ppm^{-1}$. Το σύστημα των εξισώσεων για τα C_1 έως C_8 και η εξίσωση (2.9) μπορεί να λυθεί αριθμητικά για διάφορες εκτιμήσεις για τις ανθρωπογενείς εκπομπές σε CO_2 , $F(t)$ έτσι ώστε να έχουμε μια εικόνα για τη συγκέντρωση του CO_2 στην ατμόσφαιρα για διάφορες περιπτώσεις.

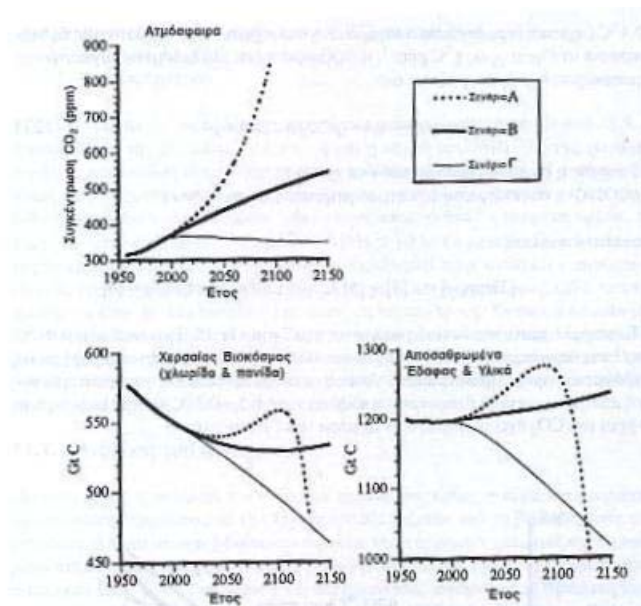
Θα θεωρήσουμε τρεις πιθανές περιπτώσεις.

Εκδοχή Α : Οι ανθρωπογενείς εκπομπές του CO_2 αυξάνονται κατά 1.5% ετησίως.

Εκδοχή Β : Οι εκπομπές του CO_2 παραμένουν σταθερές.

Εκδοχή Γ : Οι ανθρωπογενείς εκπομπές του CO_2 μειώνονται κατά 5% ετησίως αρχίζοντας από το 1989.

Αρχικά κάνοντας μία προσομοίωση για το διάστημα 1955-1990 με δεδομένα που έχουμε από υπάρχουσες μετρήσεις βλέπουμε ότι το αποτέλεσμα προσομοίωσης είναι αρκετά ακριβές και πολύ κοντά στα δεδομένα των υπάρχοντων μετρήσεων, όσον αφορά τη συγκέντρωση του CO_2 στην ατμόσφαιρα.



Σχήμα 2.6: -Το αποτέλεσμα της αριθμητικής προσομοίωσης για τις μεταβλητές C_1 , C_2 και C_3 για τις περιπτώσεις όπου έχουμε 1.5% αύξηση ανθρωπογενών εκπομπών (σενάριο A), σταθερές εκπομπές (σενάριο B) και μείωση κατά 5% εκπομπών (σενάριο C).

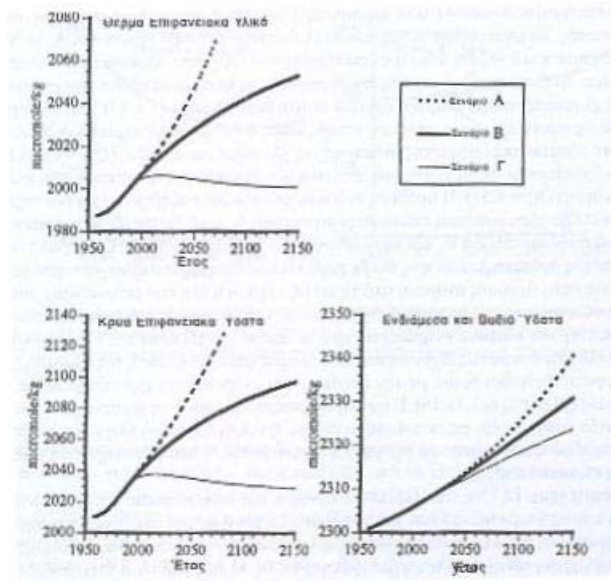
Η προσομοίωση για τις περιπτώσεις A, B, Γ και για χρονικό διάστημα 100 χρόνων, 1950-2050 με χρονικό βήμα $\Delta t = 1$ ημέρα δίνει αποτελέσματα που παρουσιάζονται στα γραφήματα (2.6) και (2.7). Βλέπουμε ότι για την ατμόσφαιρα τα θερμά επιφανειακά ύδατα, τα κρύα επιφανειακά ύδατα και τα ύδατα ενδιάμεσου και μεγάλου βάθους. Στη περίπτωση A η συγκέντρωση του άνθρακα διπλασιάζεται μέχρι το 2050. Στη περίπτωση B η συγκέντρωση του άνθρακα αυξάνεται αλλά όχι τόσο πολύ ενώ στη περίπτωση Γ μειώνεται δραστικά.

Όσον αφορά τα έμβια της Γης και τη συνιστώσα του εδάφους η συγκέντρωση του άνθρακα στη περίπτωση A αρχικά μειώνεται και ακολουθεί μία αύξηση την οποία διαδέχεται μια απότομη μείωση. Στη περίπτωση B η συγκέντρωση τείνει σε μία σταθερή τιμή ενώ στη περίπτωση Γ μειώνεται. Η δραστική μείωση στη περίπτωση A για τον άνθρακα στα έμβια Γης οφείλεται στο ότι ο όρος $D(t)$ κατά την εξέλιξη της διαδικασίας αυξάνεται πολύ σε σχέση με την εισροή άνθρακα.

Τέλος στα θερμά επιφανειακά ύδατα στα κρύα επιφανειακά ύδατα και στα ύδατα μεγάλου βάθους έχουμε στη περίπτωση A μεγάλη αύξηση της περιεκτικότητας του άνθρακα, στη περίπτωση B μικρότερη αύξηση και στη περίπτωση Γ σταθεροποίηση της περιεκτικότητας του άνθρακα.

Το συμπέρασμα είναι ότι χωρίς σταθεροποίηση η μείωση ανθρωπογενών εκπομπών CO_2 στην ατμόσφαιρα η ποσότητα CO_2 στην ατμόσφαιρα αυξάνεται με αποτέλεσμα να έχουμε αντίστοιχη αύξηση της μέσης θερμοκρασίας της Γης.

Αξιίζει να σημειωθεί ότι αυτό το μοντέλο είναι μια απλή εκδοχή μοντέλων αυτής της μορφής. Πιο ακριβής εκδοχή θα περιελάμβανε περισσότερες συνιστώσες-κιβώτια και επίσης χωρική εξάρτηση στις εξαρτημένες μεταβλητές C_i , πράγμα



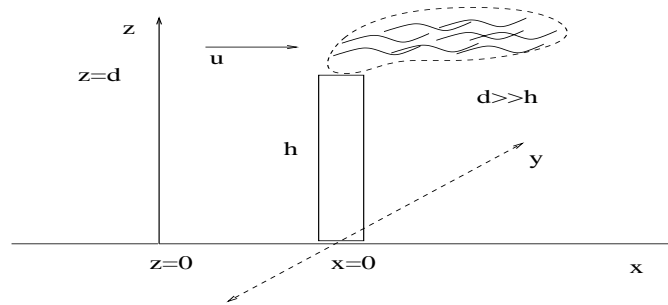
Σχήμα 2.7: Το αποτέλεσμα της αριθμητικής προσομοίωσης για τις μεταβλητές C_4 , C_4 και C_8 για τις περιπτώσεις όπου έχουμε 1.5% αύξηση ανθρωπογενών εκπομπών (σενάριο A), σταθερές εκπομπές (σενάριο B) και μείωση κατά 5% εκπομπών (σενάριο C).

που θα είχε ως αποτέλεσμα τη παραγωγή ενός πιο πολύπλοκου συστήματος μερικών διαφορικών εξισώσεων με συνέπεια την αύξηση της δυσκολίας επίλυσης και ανάλυσης του μοντέλου.

Επίσης η εξίσωση (2.9) για την μεταβολή της θερμοκρασίας σε σχέση με τη συγκέντρωση του CO_2 στην ατμόσφαιρα είναι μια σχετικά απλή προσέγγιση του θέματος. Πιο ακριβή αποτελέσματα μπορούμε να έχουμε αν συνδυάσουμε τα αποτελέσματα που πήραμε για τη μορφή της θερμοκρασίας στην επιφάνεια της Γης $T(0, t)$ λόγω μιας διαταραχής στη θερμική εισροή q στην ατμόσφαιρα, με το μοντέλο για τον κύκλο του άνθρακα. Σε αυτή τη περίπτωση το q δεν είναι μια σταθερά και έχουμε $q = f(C_1(t))$.

2.2 Διασπορά Καπνού από Ψηλή Καμινάδα

Θεωρούμε ότι έχουμε μια ψηλή καμινάδα εργοστασίου από την οποία έχουμε συνεχόμενη εκροή καπνού στην ατμόσφαιρα. Η ταχύτητα του αέρα είναι u στην κατεύθυνση του x -άξονα, αν θεωρήσουμε ένα σύστημα συντεταγμένων για το οποίο η καμινάδα βρίσκεται στον άξονα των z με τη βάση της στο σημείο $(0, 0, 0)$.



Σχήμα 2.8: Σχηματική αναπαράσταση ροής καπνού από ψηλή καμινάδα.

Θέλουμε να έχουμε μια εκτίμηση για τη συγκέντρωση καπνού κοντά στο έδαφος και σε μεγάλη απόσταση από την καμινάδα. Θέτοντας συντεταγμένες σε σχέση με τον αέρα (δηλαδή τέτοιες ώστε ο παρατηρητής να ακολουθεί τη κίνηση του αέρα) μπορούμε να πάρουμε την εξίσωση της διάχυσης για τη συγκέντρωση του καπνού $c = c(x, y, z)$,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = v \Delta c,$$

όπου v ο συντελεστής διάχυσης της συγκέντρωσης ($[v] = L^2/T$). Εάν θέσουμε (πιο σωστά) τις συντεταγμένες σε σχέση με το έδαφος, δηλαδή παίρνοντας σαν αρχή, $x = 0$ τη βάση της καμινάδας έχουμε την εξίσωση μεταφοράς διάχυσης

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = v \Delta c,$$

όπου u η ταχύτητα του αέρα ($[u] = L/T$). Ο όρος $u \frac{\partial c}{\partial x}$ μοντελοποιεί τη μεταφορά υλικού λόγω της κίνησης του αέρα.

Επειδή η ροή από τη καμινάδα είναι σταθερή μας ενδιαφέρει η στάσιμη λύση του προβλήματος. Για $\frac{\partial c}{\partial t} = 0$ μετά την πάροδο μεγάλου χρονικού διαστήματος από την αρχή λειτουργίας της καμινάδας, η εξίσωση γίνεται

$$u \frac{\partial c}{\partial x} = v \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right).$$

Για να απλοποιήσουμε το πρόβλημα ολοκληρώνουμε ως προς y για να πάρουμε ένα πρόβλημα για τη συγκέντρωση του καπνού στην κατεύθυνση x και z . Έχουμε

$\bar{c}(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} c(x, y, z) dy$ με $c \rightarrow 0$, $\frac{\partial c}{\partial y} \rightarrow 0$ για $y \rightarrow \pm\infty$ και η εξίσωση για τη ποσότητα \bar{c} γίνεται

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = v \left(\frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} \right).$$

Το πρόβλημα μπορεί να απλοποιηθεί περισσότερο επειδή ενδιαφερόμαστε για μεγάλες αποστάσεις από την καμινάδα δηλαδή για $x = O(L)$ ή μεγαλύτερο όπου $L \gg h$, και h το ύψος της καμινάδας. Έτσι με κατάλληλη αλλαγή κλίμακας, $x = L\bar{x}$, $z = h\bar{z}$ έχουμε

$$\frac{u}{L} \frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{x}} = \frac{v}{h^2} \left(\frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial \bar{z}^2} \right).$$

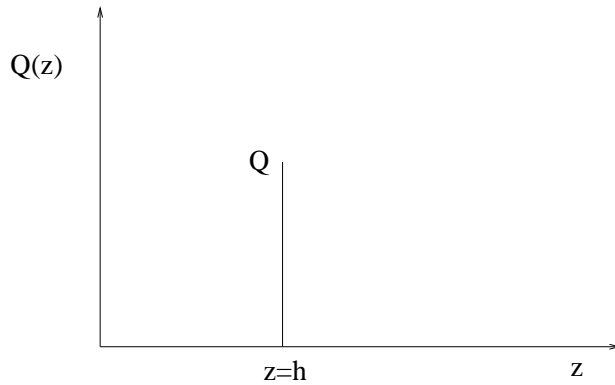
Επιπλέον για $\frac{h}{L} \ll 1$ μπορούμε να απαλείψουμε τον όρο $\frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial \bar{x}^2}$. Το πρόβλημα σε διαστατική μορφή γίνεται

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = v \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2}, \quad (2.10)$$

δηλαδή έχουμε τη μονοδιάστατη εξίσωση της θερμότητας.

Όσον αφορά τις συνοριακές συνθήκες έχουμε τα εξής :

Για τα ανώτερα στρώματα της ατμόσφαιρας (σε ύψος d) όπου $d \gg h$ είναι λογικό να θεωρήσουμε ότι δεν έχουμε ροή καπνού και $\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0$ για $z = d$ ή $\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \rightarrow 0$ για $z \rightarrow \infty$. Στο έδαφος επίσης δεν μπορούμε να έχουμε ροή καπνού άρα $\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0$ για $z = 0$. Όσον αφορά τη συνθήκη για $x = 0$, την οποία χρειαζόμαστε επειδή έχουμε παραβολική εξίσωση, έχουμε ότι η καμινάδα συμπεριφέρεται σαν πηγή καπνού με τον καπνό να εισέρχεται στην ατμόσφαιρα με σταθερή ροή Q στο σημείο $(x, z) = (0, h)$.



Σχήμα 2.9: Αρχική συνθήκη για την εξίσωση (2.10).

Χρειαζόμαστε μια συνάρτηση που να έχει μοναδιαία τιμή στο σημείο $z = h$ πάνω στην ευθεία $x = 0$ ενώ παντού αλλού πάνω στην ευθεία είναι μηδέν. Αυτό

μπορούμε να το εκφράσουμε χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση $\delta(z)$, δηλαδή τη συνάρτηση δέλτα ή συνάρτηση Dirac. Η συνάρτηση δέλτα έχει τις εξής ιδιότητες.

i) $\delta(z) = 0$ για $z \neq 0$,

ii) $\int_{-a}^a \delta(z)f(z)dz = f(0)$ για κάθε ομαλή συνάρτηση $f(z)$.

Μπορούμε δηλαδή να περιγράψουμε τη συνάρτηση δέλτα σαν μία αιχμή με μοναδιαία επιφάνεια στο $z = 0$. Θέτουμε λοιπόν σαν 'αρχική συνθήκη' στο $x = 0$,

$$\bar{c}(0, z) = \frac{Q}{u} \delta(z - h).$$

Απλοποιούμε περαιτέρω το πρόβλημα κανονικοποιώντας τις μεταβλητές ως εξής : $z = h\hat{z}$, $x = u\frac{h^2}{v}\hat{x}$, και $\bar{c} = \frac{Q}{uh}\hat{c}$, και το πρόβλημα γίνεται

$$u \frac{\partial \hat{c}}{\partial \hat{x}} = \frac{\partial^2 \hat{c}}{\partial \hat{z}^2}, \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial \hat{c}}{\partial \hat{z}} = 0, \quad \text{για } \hat{z} = 0, \quad \frac{\partial \hat{c}}{\partial \hat{z}} \rightarrow 0, \quad \text{για } \hat{z} \rightarrow \infty, \quad (2.12)$$

$$\hat{c} = \delta(\hat{z} - 1) \quad \text{για } \hat{x} = 0. \quad (2.13)$$

Σε αυτό το σημείο πρέπει να επισημάνουμε ότι για να είναι ρεαλιστική η παραπάνω τροποποίηση του προβλήματος η χαρακτηριστική κλίμακα του x πρέπει να είναι πολύ μεγαλύτερη από αυτή του z , δηλαδή χρειαζόμαστε $u\frac{h^2}{v} \gg h$ ή $hu \gg v$.

Αυτό το πρόβλημα μπορούμε να το λύσουμε χρησιμοποιώντας τη θεμελιώδη λύση της εξίσωσης της θερμότητας. Για το πρόβλημα

$$u \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

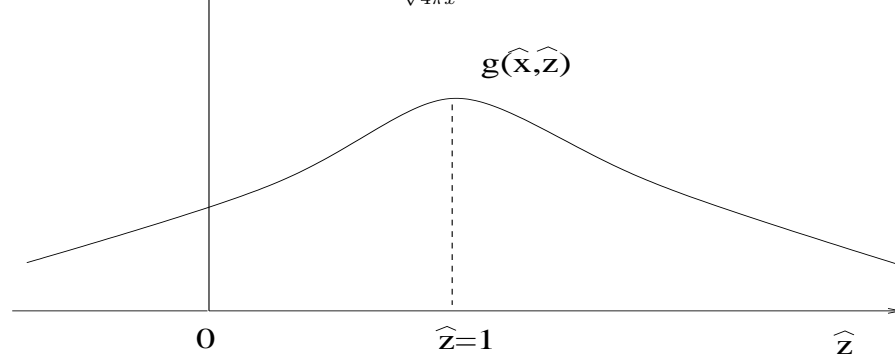
$$\frac{\partial u}{\partial x} \rightarrow 0, \quad \text{για } x \rightarrow \pm\infty,$$

$$u = \delta(x) \quad \text{για } t = 0.$$

η λύση είναι $u = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} e^{-\frac{x^2}{4t}}$.

Για το πρόβλημα (2.11-2.13) χρησιμοποιούμε τη θεμελιώδη λύση με σημειακή

πηγή στο $z = 1$, δηλαδή $g(\hat{x}, \hat{z}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi \hat{x}}} e^{-\frac{(\hat{z}-1)^2}{4\hat{x}}}$.



Σχήμα 2.10: Θεμελιώδης λύση στο $\hat{z} = 1$.

Για να ικανοποιείται η συνοριακή συνθήκη για $z = 0$ πρέπει $\frac{\partial \hat{c}}{\partial \hat{z}} = 0$ άρα για να βρούμε τη λύση του προβλήματος πρέπει να αφαιρέσουμε ποσότητα ίση με

τη συνεισφορά της g στο $z = 0$ για να πάρουμε μια λύση που ικανοποιεί τις συνοριακές συνθήκες. Αυτό επιτυγχάνεται θεωρώντας μια εικονική συνεισφορά από μια πηγή στο $z = -1$ η οποία θα έχει την μορφή $\frac{1}{\sqrt{4\pi\hat{x}}}e^{-\frac{(\hat{z}+1)^2}{4\hat{x}}}$. Άρα η λύση έχει τη μορφή

$$\hat{c} = \frac{1}{\sqrt{4\pi\hat{x}}}e^{-\frac{(\hat{z}-1)^2}{4\hat{x}}} + \frac{a}{\sqrt{4\pi\hat{x}}}e^{-\frac{(\hat{z}+1)^2}{4\hat{x}}},$$

όπου a είναι μια σταθερά που μπορεί να προσδιοριστεί έτσι ώστε να ικανοποιούνται οι συνοριακές συνθήκες. Πιο συγκεκριμένα έχουμε

$$\frac{\partial \hat{c}}{\partial \hat{z}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi\hat{x}}} \left(-(-1)\frac{e^{-\frac{1}{4\hat{x}}}}{2\hat{x}} - a\frac{e^{-\frac{1}{4\hat{x}}}}{2\hat{x}} \right) = 0,$$

για $\hat{z} = 0$ άρα πρέπει $a = 1$. Επομένως η λύση του προβλήματος (2.11) είναι

$$\hat{c} = \frac{1}{\sqrt{4\pi\hat{x}}} \left(e^{-\frac{(\hat{z}-1)^2}{4\hat{x}}} + e^{-\frac{(\hat{z}+1)^2}{4\hat{x}}} \right).$$

Από τη μορφή της λύσης του προβλήματος βλέπουμε ότι η συγκέντρωση του καπνού είναι πυκνότερη στο έδαφος, για $z = 0$ έχουμε τη μέγιστη τιμή με $\hat{c}(\hat{x}, 0) = \frac{1}{\sqrt{\pi\hat{x}}}e^{-\frac{1}{4\hat{x}}}$. Το ίδιο συμβαίνει για $\hat{x} = \frac{1}{2}$ δηλαδή σε απόσταση από τη καμινάδα $x = \frac{h^2 u}{2v}$.

2.3 Διάχυση μόλυνσης σε μια λίμνη

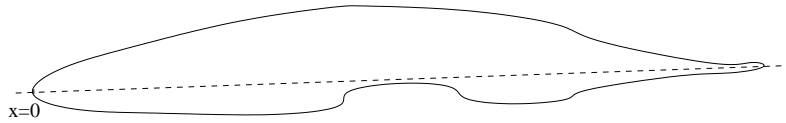
Θεωρούμε μια λίμνη με μακρόστενη μορφολογία η οποία είναι μολυσμένη από κάποια χημική ουσία. Επίσης υποθέτουμε ότι η μολυσματική ουσία αρχικά είναι ομοιόμορφα κατανεμημένη δηλαδή η συγκέντρωση της μόλυνσης είναι παντού C_0 . Η λίμνη μπορεί να αυτοκαθαριστεί συνδέοντας το ένα άκρο της με ένα ρεύμα καθαρού νερού έτσι ώστε η μία άκρη να έχει συγκέντρωση μολυσματικής ουσίας σταθερή και ίση με μηδέν.

Θεωρούμε επίσης ότι η μολυσματική ουσία διαχέεται στον όγκο της λίμνης και αν C είναι η συγκέντρωση της έχουμε την εξίσωση

$$C_t = v\Delta C,$$

όπου v είναι ο συντελεστής διάχυσης.

Από την υπόθεση ότι η λίμνη έχει μακρόστενη μορφολογία μπορούμε να απλοποιήσουμε το πρόβλημα θεωρώντας το μονοδιάστατο, δηλαδή ότι $C = C(x)$, για $0 < x < \infty$ αν θεωρήσουμε ότι στα σημεία $x = 0$ και $x = \infty$ βρίσκονται τα δύο άκρα της λίμνης η οποία έχει πολύ μεγάλο μήκος.



Σχήμα 2.11: Λίμνη με μακρόστενη μορφολογία

Το πρόβλημα λοιπόν παίρνει τη μορφή

$$\begin{aligned} C_t(x, t) &= vC_{xx}(x, t), & 0 < x < \infty, & \quad t > 0, \\ C(0, t) &= 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} C(x, t) = 0, & & \quad t > 0, \\ C(x, 0) &= C_0, & 0 < x < \infty. & \end{aligned} \quad (2.14)$$

Για το πρόβλημα αυτό θα αναζητήσουμε λύση ομοιότητας. Μια τέτοια λύση είναι συχνά χρήσιμη γιατί μας δίνει μια έκφραση της άγνωστης συνάρτησης σε κλειστή μορφή όταν δεν προσδιορίζονται από το πρόβλημα συγκεκριμένες χωρικές ή χρονικές κλίμακες. Αυτές θα μπορούσαν να μας δώσουν εν δυνάμει κάποια μικρή παράμετρο έτσι ώστε να πάρουμε κάποιο ανάπτυγμα διαταραχής.

Επίσης μία τέτοια λύση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για δοκιμή σε αριθμητικές μεθόδους επειδή συχνά μπορούν να δώσουν τη τοπική συμπεριφορά μίας λύσης

όπως για παράδειγμα για μικρούς χρόνους και αποστάσεις σε σχέση με τα μεγέθη του προβλήματος (εδώ $0 < x < \infty$). Με αυτόν το τρόπο παίρνουμε μια ένδειξη για την αξία του μοντέλου.

Θεωρούμε ότι η λύση έχει τη μορφή $C = t^b f(\xi)$ όπου $\xi = \frac{x}{t^a}$ είναι η μεταβλητή ομοιότητας. Η εξίσωση (2.14) γίνεται

$$bt^{b-1}f(\xi) + t^b(-axt^{-a-1})f'(\xi) = t^{b-1}(bf(\xi) - a\xi f'(\xi)) = vt^{b-2a}f''(\xi),$$

ή

$$t^{2a-1}(bf(\xi) - a\xi f'(\xi)) = vf''(\xi).$$

Για να απαλείψουμε τον χρόνο χρειαζόμαστε $a = \frac{1}{2}$. Επομένως $C = t^b f(\frac{x}{\sqrt{t}})$ και η εξίσωση παίρνει τη μορφή

$$vf''(\xi) + \frac{1}{2}\xi f'(\xi) - bf(\xi) = 0.$$

Ο προσδιορισμός του b μπορεί να γίνει από την αρχική συνθήκη. Αυτή υποδεικνύει ότι για $t \rightarrow 0$ πρέπει να έχουμε $C \rightarrow C_0$ ή εναλλακτικά ότι η συνάρτηση $f(\xi)$ πρέπει να έχει τη μορφή κάποιας δύναμης του ξ καθώς $t \rightarrow 0$ για να αποφύγουμε την εξάρτηση από τα x και t . Επομένως θεωρούμε ότι $f(\xi) \sim a\xi^\gamma$ για κάποια σταθερά c . Τότε

$$C = t^b c a \xi^\gamma t^{-\frac{\gamma}{2}} = c a \xi^\gamma t^{b-\frac{\gamma}{2}}.$$

Επομένως για να αποφύγουμε τα όρια $C \rightarrow 0$ και $C \rightarrow \infty$ για $t \rightarrow 0$ πρέπει να έχουμε $b = \frac{\gamma}{2}$. Άρα $C(x, 0) = C_0 = c a \xi^\gamma$ και αυτή η σχέση ισχύει μόνο για $\gamma = 0$ άρα τελικά και $b = 0$.

Η εξίσωση τώρα έχει τη μορφή

$$vf''(\xi) + \frac{1}{2}\xi f'(\xi) = 0.$$

Ολοκληρώνοντας παίρνουμε

$$f'(\xi) = A e^{-\frac{\xi^2}{4v}},$$

και

$$f(\xi) = A \int_0^{\frac{\xi}{\sqrt{v}}} e^{-\frac{s^2}{4v}} ds + B,$$

Χρησιμοποιούμε τη συνοριακή συνθήκη στο $x = 0$ για να προσδιορίσουμε το B και έχουμε ότι για $x = 0$ πρέπει $C(0, t) = 0 = B$. Επομένως

$$C = 2\sqrt{v}A \int_0^{\frac{x}{2\sqrt{vt}}} e^{-\eta^2} d\eta = \sqrt{v\pi}A \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{vt}}\right)$$

Η συνάρτηση erf , (error function) ορίζεται από τη σχέση

$$erf(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\eta^2} d\eta,$$

και έχει τις ιδιότητες $erf(0) = 0$ και $\lim_{z \rightarrow \infty} erf(z) = 1$.

Από την αρχική συνθήκη $C(x, 0) = C_0 = \sqrt{v\pi}A$ παίρνουμε $A = \frac{C_0}{\sqrt{v\pi}}$, επομένως η μορφή της λύσης γίνεται

$$C(x, t) = C_0 erf\left(\frac{x}{2\sqrt{vt}}\right).$$

Για $\frac{x}{\sqrt{vt}} \gg 1$ έχουμε $C \simeq C_0$ ενώ $C_x \ll 1$. Δηλαδή για μικρό χρονικό διάστημα δεν βλέπουμε την επίδραση της συνοριακής συνθήκη για $x \gg 1$ και το μοντέλο δίνει μια επαρκή προσέγγιση για $t \ll \frac{L^2}{v}$ όπου L μια αρκετά μεγάλη απόσταση από το σημείο $x = 0$.

Για να πάρουμε το $\frac{1}{20}$ της αρχικής μόλυνσης σε κάποιο σημείο της λίμνης $x = x_0$ πρέπει να έχουμε

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{20} = erf\left(\frac{x}{2\sqrt{vt}}\right)$$

ή

$$\int_0^{\frac{x}{2\sqrt{vt}}} e^{-\eta^2} d\eta \simeq \frac{\sqrt{\pi}}{40} \simeq 0.045,$$

γιατί για $\frac{x}{2\sqrt{vt}} \ll 1$ έχουμε ότι

$$\int_0^{\frac{x}{2\sqrt{vt}}} e^{-\eta^2} d\eta \simeq \frac{x}{2\sqrt{vt}}.$$

Συνεπώς, δεδομένου ότι μια χαρακτηριστική τιμή για τη σταθερά διάχυσης για μια μολυσματική ουσία είναι $v = 10^{-2} \frac{\text{miles}}{\text{year}}$, παίρνουμε $vt = \frac{x^2}{(0.009)^2} \simeq 120x^2$.

Αυτό σημαίνει ότι για να αυτοκαθαριστεί η λίμνη ένα μίλι μακριά από το σημείο $x = 0$ χρειάζονται 10^{10} χρόνια. Το συμπέρασμα είναι ότι η διάχυση είναι ανεπαρκής μηχανισμός από μόνος του για να καθαριστεί έστω και μία μικρή λίμνη. Η απομάκρυνση της μολυσματικής ουσίας με κάποιο τρόπο είναι απαραίτητη.

2.4 Ροή υπόγειων υδάτων

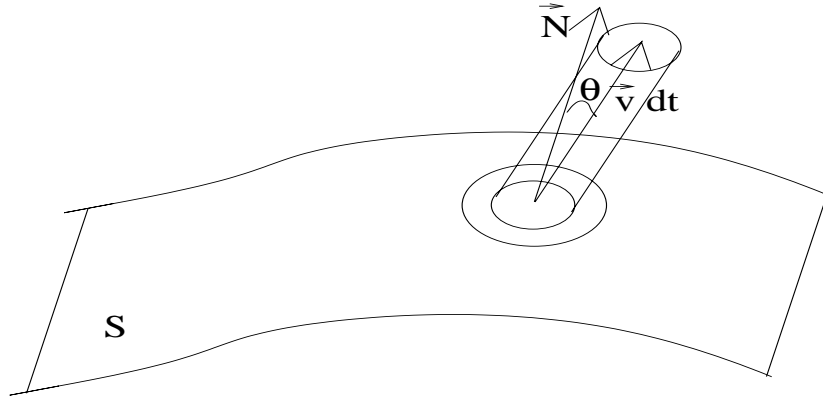
2.4.1 Εξισώσεις κίνησης ρευστών

Υποθέτουμε ότι μία περιοχή του τρισδιάστατου χώρου καταλαμβάνεται από ένα ρευστό (υγρό ή αέριο) σε κίνηση. Έχουμε δύο προσεγγίσεις για να περιγράψουμε τη κίνηση :

Προσέγγιση Lagrange Προσπαθούμε να προσδιορίσουμε τη θέση (a, b, c, t) για κάθε χρονική στιγμή t ενός σωματιδίου του ρευστού το οποίο βρίσκεται στο σημείο (a, b, c) τη χρονική στιγμή $t = 0$.

Προσέγγιση Euler Προσπαθούμε να προσδιορίσουμε τη ταχύτητα $\vec{v}(x, y, z, t)$, τη πυκνότητα $\rho(x, y, z)$ και άλλες φυσικές μεταβλητές όπως η πίεση $P(x, y, z)$ για κάθε χρονική στιγμή t σε κάθε σημείο (x, y, z) στη περιοχή που περιέχεται το ρευστό.

Υποθέτουμε πάντα ότι η ταχύτητα, η πυκνότητα και η πίεση μεταβάλλονται ομαλά ως προς κάθε τους μεταβλητή. Θεωρούμε μια κλειστή επιφάνεια S στο ρευστό που περιέχει ένα χωρίο D . Δηλαδή συγκεντρώνουμε τη προσοχή μας σε ένα συγκεκριμένο στοιχειώδες χωρίο του ρευστού. Υποθέτουμε επιπλέον ότι δεν έχουμε πηγές ή διαρροές ρευστού σε κάποιο σημείο. Με βάση αυτές τις υποθέσεις από το νόμο διατήρησης της μάζας έχουμε ότι ο ρυθμός μεταβολής της μάζας του ρευστού στο χωρίο D ισούται με το ρυθμό με τον οποίο το ρευστό εισέρχεται στο D κατά μήκος της S .



Σχήμα 2.12: Ροή ρευστού στο σύνορο S

Έστω dS μία μικρή στοιχειώδη περιοχή στο σημείο Q στην επιφάνεια S . Το ρευστό που διαπερνά το dS μεταξύ του χρόνου t και $t + dt$ καταλαμβάνει ένα κύλινδρο βάσης dS και ύψους $\vec{v}(Q)dt \cos(\theta)$ όπου θ είναι η γωνία των $\vec{v}(Q)$ και $\vec{N}(Q)$, όπου $\vec{N}(Q)$ είναι το κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια S στο σημείο Q με φορά προς τα έξω.

Επομένως ο κύλινδρος έχει όγκο

$$V_c = \bar{v}(Q)\vec{N}(Q)dSdt. \quad (2.15)$$

Επίσης ο ρυθμός με τον οποίο το ρευστό διαπερνά την επιφάνεια S μας δίνεται από το επιφανειακό ολοκλήρωμα

$$\int_S \bar{v}\vec{N}dS = \int_S \bar{v}d\tilde{S} \quad (2.16)$$

όπου $d\tilde{S} = \vec{N}dS$. Η σχέση (2.15) μας δίνει τον όγκο του ρευστού που διαπερνά το dS . Επομένως η μάζα που διαπερνά το dS μεταξύ του χρόνου t και $t+dt$ είναι

$$\rho\bar{v}(Q)\vec{N}(Q)dSdt, \quad (2.17)$$

όπου ρ είναι η πυκνότητα του ρευστού. Επομένως ο ρυθμός με τον οποίο η μάζα του ρευστού εξέρχεται από το D κατά μήκος της S είναι

$$\int_S \rho\bar{v}\vec{N}dS.$$

Ο ρυθμός με τον οποίο η μάζα εισέρχεται στο D θα είναι $-\int_S \rho\bar{v}(Q)\vec{N}(Q)dS$, και άρα εφόσον έχουμε διατήρηση της μάζας από το θεώρημα απόκλισης παίρνουμε

$$\int_D \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int_S \rho\bar{v}\vec{N}d = - \int_D \text{div}(\rho\bar{v})dV,$$

ή δεδομένου ότι το D είναι ένα τυχαίο υποχωρίο που καταλαμβάνει το ρευστό έχουμε

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho\bar{v}) = 0. \quad (2.18)$$

Η εξίσωση (2.18) ονομάζεται εξίσωση συνέχειας και είναι ένας νόμος διατήρησης που αφορά στη κίνηση ενός ρευστού και ισχύει για κάθε περιοχή που καταλαμβάνει το ρευστό. Για ένα ασυμπίεστο ρευστό (πχ. το νερό είναι τέτοιο) έχουμε ότι η πυκνότητα δεν μεταβάλλεται, $\rho = \text{σταθερά}$ και η εξίσωση συνέχειας γίνεται

$$\text{div}(\bar{v}) = 0,$$

και η ταχύτητα \bar{v} είναι ένα σωληνοειδές διανυσματικό πεδίο.

Ένα άλλο στοιχείο που πρέπει να λάβουμε υπόψιν είναι ότι η κίνηση του ρευστού θα πρέπει να καθορίζεται και από το δεύτερο νόμο του Newton, δηλαδή ο ρυθμός μεταβολής της ορμής κάθε μέρους του ρευστού είναι ίσος με το άθροισμα των δυνάμεων που ασκούνται σε αυτό.

Έχουμε ότι για κάθε χρονική στιγμή η ορμή είναι $\int_D \rho\bar{v}dV$ και μεταβάλλεται με ρυθμό

$$\int_D \frac{\partial}{\partial t} (\rho\bar{v}) dV.$$

- Η μεταβολή της ορμής οφείλεται στους παρακάτω λόγους
- α) Στην ορμή κατά μήκος του S ,
 - β) Στη πίεση που ασκείται στο ρευστό στο χωρίο D από το ρευστό που καταλαμβάνει το εξωτερικό χωρίο από το D ,
 - γ) Στις διάφορες εξωτερικές δυνάμεις όπως π.χ. βαρύτητα, ηλεκτρομαγνητικές δυνάμεις κτλ., που ασκούνται στο D .
- α) Η ορμή μεταφέρεται κατά μήκος της επιφάνειας S στο D με ρυθμό

$$- \int_S \vec{v} (\rho \vec{v} \cdot \vec{N}) dS.$$

- β) Η πίεση του ρευστού στο D ασκείται στο S στη κατεύθυνση του διανύσματος $-\vec{N}$. Επομένως η δύναμη που εξασκείται στο D από το υπόλοιπο ρευστό είναι

$$- \int_S P \vec{N} dS,$$

όπου P είναι η πίεση.

- γ) Οι εξωτερικές δυνάμεις (σε μονάδες δύναμης ανά μονάδα μάζας) θα είναι

$$\int_D \rho \vec{F} dV$$

Συνοψίζοντας η εφαρμογή του δεύτερου νόμου του Newton και του θεωρήματος της απόκλισης, μας δίνει την εξίσωση

$$\begin{aligned} \int_D \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) dV &= - \int_S \vec{v} (\rho \vec{v} \cdot \vec{N}) dS - \int_S P \vec{N} dS + \int_D \rho \vec{F} dV \\ &= \int_D [\rho (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \vec{v} \operatorname{div} (\rho \vec{v})] dV - \int_D \nabla P dV + \int_D \rho \vec{F} dV, \end{aligned}$$

ή

$$\int_D \left[\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v} \operatorname{div} (\rho \vec{v}) + \rho (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \nabla P - \rho \vec{F} \right] dV = 0. \quad (2.19)$$

Στην εξίσωση (2.19) ο δεύτερος και ο τρίτος όρος του ολοκληρώματος μας δίνει μηδέν λόγω της εξίσωσης της συνέχειας. Επομένως αφού το χωρίο D είναι τυχαίο έχουμε

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = -\nabla P + \rho \vec{F}. \quad (2.20)$$

Η εξίσωση (2.20) είναι η εξίσωση κίνησης ρευστού. Η εξίσωση (2.18) και (2.20) ονομάζονται εξισώσεις Euler

Στη περίπτωση που έχουμε ένα ρευστό με ιξώδες, δηλαδή έχουμε εσωτερική τριβή ανάμεσα στα μόρια του ρευστού, με μια ανάλογη διαδικασία μπορεί να αποδειχθεί ότι η επιρροή αυτού του φαινομένου στο σύνολο των παραγόντων που

μεταβάλλον την ορμή του ρευστού μπορεί να αναπαρασταθεί από έναν όρο της μορφής $r\Delta\vec{v}$ όπου $r > 0$ είναι μια σταθερά. Σε αυτή τη περίπτωση η εξίσωση κίνησης του ρευστού γίνεται

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} - r \Delta \vec{v} = -\nabla P + \rho \vec{F}. \quad (2.21)$$

Αυτή είναι η εξίσωση Navier - Stokes. Για $r \rightarrow 0$ και μαζί με την εξίσωση της συνέχειας παίρνουμε τις εξισώσεις Euler.

2.4.2 Κίνηση υπόγειων υδάτων

Η μοντελοποίηση της κίνησης των υπόγειων υδάτων είναι ένα αρκετά σύνθετο αντικείμενο. Ο λόγος για αυτό είναι ότι δεν είναι πάντα εύκολο να έχουμε στοιχεία για τη μορφολογία του υπεδάφους όπως και η ανομοιογένεια που παρουσιάζουν τα διάφορα στρώματα από πορώδη υλικά μέσα στα οποία λαμβάνει χώρα η κίνηση των υδάτων.

Για τη παραγωγή των εξισώσεων για τη κίνηση των υπόγειων υδάτων πρέπει να γνωρίζουμε τη στρωματογραφία του υπεδάφους όπως και την υδραυλική κλίση των υδάτων (hydraulic gradient) στα συγκεκριμένα στρώματα.

Χαρακτηριστικό της κίνησης των υπόγειων υδάτων είναι η πολύ αργή κίνηση τους μέσα στα πορώδη στρώματα του υπεδάφους. Για παράδειγμα μια χαρακτηριστική τιμή της ταχύτητας είναι 1 cm/day . Επίσης συνήθως τέτοια υδροφόρα στρώματα έχουν σχηματιστεί πριν χιλιάδες χρόνια. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα το γεγονός ότι τα υδροφόρα στρώματα δύσκολα μολύνονται αλλά εάν αυτό συμβεί πολύ πιο δύσκολα μπορούν να αποκατασταθούν.

Αιτίες μόλυνσης υδροφόρων στρωμάτων αποτελούν η χρήση λιπασμάτων, οι διαρροές από υπόγεια φυλαγμένα απόβλητα, τα απόβλητα βιομηχανικών μονάδων, η επιχωμάτωση σκουπιδιών, η διάβρωση υπόγειων αγωγών κτλ.

Σαν πρώτο βήμα για τη μοντελοποίηση του φαινομένου θα καταστρώσουμε μια εξίσωση για τη κίνηση των υδάτων σε πορώδες υλικό.

Ο νόμος του Darcy Το 1856 ο μηχανικός H. Darcy παρουσίασε ένα εμπειρικό νόμο για τη κίνηση των υδάτων σε πορώδες υλικό. Σύμφωνα με αυτό το νόμο το μέτρο της ταχύτητας κίνησης των υδάτων, η λεγόμενη ειδική παροχή (specific discharge) είναι απευθείας ανάλογη με την υδραυλική κλίση. Έχουμε δηλαδή ότι

$$v_1 \propto \frac{\Delta h}{\Delta x}, \quad (2.22)$$

όπου

v_1 : η ειδική απόδοση κατά τη x διεύθυνση (μέτρο της ταχύτητας κίνησης υδάτων σε μία διάσταση) ($[v_1] = LT^{-1}$),

Δx : η απόσταση μεταξύ δύο σημείων x_1 και x_2 στο πορώδες υλικό ($[\Delta x] = L$),

Δh : η διαφορά υδραυλικής στάθμης μεταξύ των δύο σημείων x_1 και x_2 στο πορώδες υλικό ($[\Delta h] = L$).

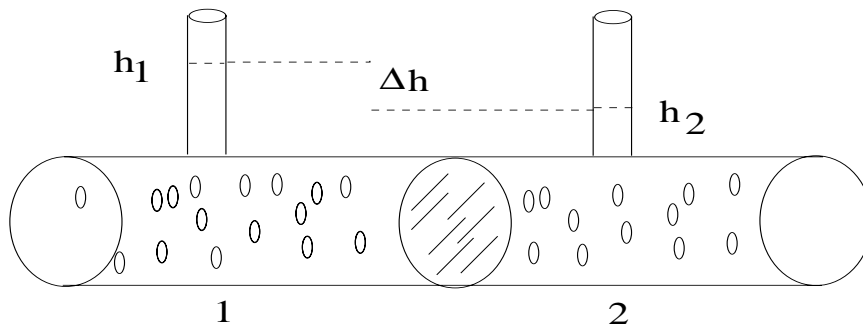
Στη περίπτωση που διπλασιαστεί η διαφορά της υδραυλικής ανύψωσης έχουμε και διπλασιασμό της ταχύτητας του ρευστού στο πορώδες υλικό. Επίσης στην σχέση (2.22) χρειαζόμαστε μία σταθερά προκειμένου η εξίσωση να είναι διαστατικά σωστή. Θέτουμε

$$v_1 = -K_1 \frac{\Delta h}{\Delta x}, \quad (2.23)$$

όπου

K_1 : η υδραυλική αγωγιμότητα κορεσμού στη κατεύθυνση της ταχύτητας ($[K_1] = LT^{-1}$).

Το πρόσημο πλην στην εξίσωση (2.23) είναι απαραίτητο γιατί το νερό ρέει από



Σχήμα 2.13: Διαφορά υδραυλικής ανύψωσης Δh μεταξύ των σημείων 1 και 2.

σημεία με μεγαλύτερη πίεση (υψηλό δυναμικό) προς σημεία με μικρότερη πίεση (χαμηλό δυναμικό). Η σταθερά K_1 είναι μέτρο των ιδιοτήτων του ρευστού αλλά και του υδροφόρου στρώματος. Γενικά η τιμή της σταθεράς K_1 είναι μέγιστη σε στρώματα που αποτελούνται από άμμο. Η ειδική απόδοση v_1 πολλές φορές αναφέρεται και σαν επιφανειακή ταχύτητα ή ταχύτητα Darcy.

Επειδή μελετάμε κίνηση σε πορώδες υλικό χρησιμοποιούμε σαν πιο ακριβές μέτρο της ταχύτητας των υδάτων τον λόγο της ταχύτητας v_1 προς το λόγο του πορώδους n .

$$u_1 = \frac{v_1}{n},$$

όπου το πορώδες n ορίζεται να είναι ο όγκος κενών σε ένα υλικό προς τον συνολικό όγκο του υλικού. Ένα ακόμα πιο ακριβές μέτρο της ταχύτητας είναι ο λόγος της ταχύτητας Darcy προς το λεγόμενο ενεργό πορώδες n_e . Δηλαδή

$$u_1 = \frac{v_1}{n_e}.$$

Το ενεργό πορώδες n_e μας δίνει ένα μέτρο του μέρους του όγκου του υλικού μέσα στο οποίο το ρευστό μπορεί να κινηθεί. Η ταχύτητα u_1 ονομάζεται και πραγματική ταχύτητα του ρευστού.

Πολλές φορές είναι επιθυμητό να έχουμε ένα μέτρο της ογκομετρικής ροής του υδάτινου στρώματος που διαπερνά μια διατομή εμβαδού A . Θέτουμε

$$Q = -K_1 A \frac{\Delta h}{\Delta x},$$

όπου

Q : ογκομετρική ροή υδάτων ($[Q] = L^3 T^{-1}$).

Εμπειρικοί νόμοι προσδιορισμού της υδραυλικής αγωγιμότητας κορροσμού Η υδραυλική αγωγιμότητα κορροσμού εξαρτάται από τις ιδιότητες του

ρευστού αλλά και του πορώδους υλικού. Αυτή προσδιορίζεται από τον ακόλουθο εμπειρικό νόμο.

$$K = \frac{cd^2 \rho g}{\mu} = \frac{k \rho g}{\mu},$$

όπου

c : σταθερά αναλογίας (αδιάστατη),

d : διάμετρος σωματιδίων (κόκκων) ($[d] = L$),

ρ : πυκνότητα ρευστού ($[\rho] = ML^{-3}$),

g : σταθερά βαρύτητας ($[g] = LT^{-2}$),

μ : ιξώδες ($[\mu] = ML^{-1}T^{-1}$),

$k = cd^2$: εγγενής διαπερατότητα ($[k] = L^2$).

Οι ιδιότητες του πορώδους υλικού εκφράζονται από τη παράμετρο $k = cd^2$, ενώ οι ιδιότητες του ρευστού που το διαρρέει από τις παραμέτρους μ και ρ . Ένας άλλος εμπειρικός νόμος για τον προσδιορισμό της υδραυλικής αγωγιμότητας κορεσμού είναι ο νόμος του Hazen ο οποίος ισχύει για άμμο που αποτελείται από ομοιόμορφα σωματίδια. Σύμφωνα με αυτόν

$$K = ad_{10}^2,$$

όπου

a : σταθερά Hazen ($[a] = L^{-1}T^{-1}$),

d_{10} : διάμετρος σωματιδίων τέτοια ώστε το 10% της μάζας των σωματιδίων να έχουν διάμετρο μικρότερη από αυτή ($[d_{10}] = L$).

Τέλος η εξίσωση Cozeny-Carmen είναι μια ακόμα σχέση που μας δίνει μια εκτίμηση της υδραυλικής αγωγιμότητας κορεσμού K .

$$K = \frac{n^3}{(1-n)^2} \left(\frac{d_m^2}{180} \right) \frac{\rho g}{\mu},$$

όπου

n : το πορώδες του υλικού (αδιάστατο),

d_m : μέση διάμετρος σωματιδίων ($[d_m] = L$).

Για να μελετήσουμε τη κίνηση ενός ρευστού σε πορώδες υλικό το οποίο καταλαμβάνει ένα τρισδιάστατο χωρίο χρειαζόμαστε το νόμο του Darcy στις τρεις διαστάσεις, δηλαδή

$$v_1 = -K_1 \frac{\partial h}{\partial x}, \quad (2.24)$$

$$v_2 = -K_2 \frac{\partial h}{\partial y}, \quad (2.25)$$

$$v_3 = -K_3 \frac{\partial h}{\partial z}, \quad (2.26)$$

όπου v_1, v_2, v_3 οι ταχύτητες στην διαμήκη, εγκάρσια και κάθετη κατεύθυνση αντίστοιχα, K_1, K_2, K_3 οι αντίστοιχες σταθερές υδραυλικής αγωγιμότητας κορεσμού και $h = h(x, y, z), (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$.

Πρέπει να σημειώσουμε ότι οι εξισώσεις (2.24), (2.25), και (2.26) υπόκεινται σε κάποιους περιορισμούς, εξάλλου δε πρέπει να ξεχνάμε ότι είναι εμπειρικοί νόμοι. Για πολύ χαμηλές ταχύτητες η διαφορά υδραυλικής ανύψωσης μπορεί να είναι χαμηλότερη από μια κρίσιμη τιμή κάτω από την οποία δεν έχουμε κίνηση του ρευστού ενώ για μεγάλες ταχύτητες η σχέση της ταχύτητας και της διαφοράς υδραυλικής ανύψωσης μπορεί να μην είναι γραμμική.

Όσον αφορά τις σχέσεις (2.24), (2.25), και (2.26) έχουμε ότι όταν τα K_1 , K_2 , K_3 είναι διαφορετικά μεταξύ τους η ροή ονομάζεται ανισοτροπική ενώ είναι ισότροπη όταν $K_1 = K_2 = K_3$.

Επίσης εάν τα K_1 , K_2 , K_3 μεταβάλλονται από σημείο σε σημείο στο υδροφόρο στρώμα δηλαδή $K_i = K_i(x, y, z)$, $i = 1, 2, 3$ η ροή ονομάζεται μη ομογενής. Εάν τα K_1 , K_2 , K_3 είναι σταθερές για κάθε σημείο του υδροφόρου ορίζοντα η ροή είναι ομογενής.

Μια συχνή περίπτωση είναι να έχουμε ομογενείς και ανισοτροπικές συνθήκες όσον αφορά τη ροή. Συνήθως έχουμε ότι $K_1 = K_2 > K_3$ επειδή η ροή σε οριζόντιο επίπεδο είναι πιο εύκολη σε διαστρωματικά κοιτάσματα νερού.

Η υδραυλική στάθμη (hydraulic head) είναι ένα μέτρο ενέργειας ανα μοναδιαίο όγκο του νερού. Αυτή μπορεί να εκφραστεί με τον ακόλουθο τρόπο

$$h = z + \frac{P}{\rho g} + \frac{v^2}{2g}, \quad (2.27)$$

όπου

h : υδραυλική στάθμη ($[h] = L$),

z : ανύψωση της στάθμης του νερού πάνω από το σημείο αναφοράς ($[z] = L$),

ρ : πυκνότητα νερού ($[\rho] = ML^{-3}$),

P : πίεση ($[P] = ML^{-1}T^{-2}$),

g : σταθερά βαρύτητας ($[g] = LT^{-2}$),

v : ταχύτητα νερού ($[v] = LT^{-1}$),

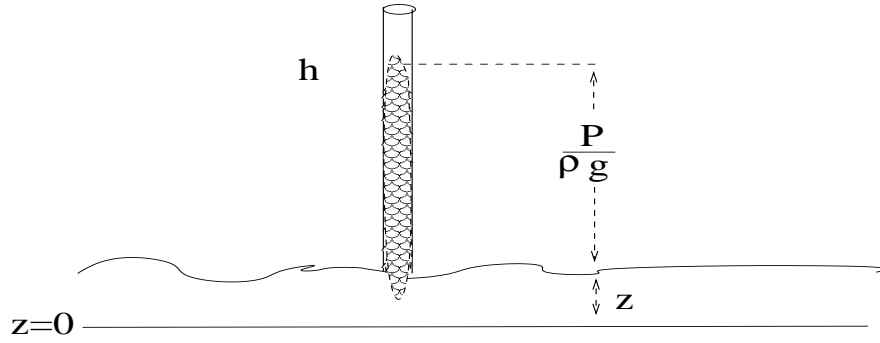
Συνήθως ο όρος $\frac{v^2}{\rho g}$ δηλαδή η κινητική ενέργεια είναι αμελητέος και η ανύψωση του νερού αναφέρεται σε σχέση με το μέσο επίπεδο της θάλασσας. Πρακτικά η εξίσωση (2.27) δίνει το ύψος της στήλης, h , που θα σχηματιζότανε, λόγω της ενέργειας που εκφράζεται από τον όρο $\frac{P}{\rho g}$ εάν ανοίγαμε ένα πηγάδι πάνω από τον υδροφόρο στρώμα το οποίο βρίσκεται σε ύψος z σε σχέση με το μέσο επίπεδο της θάλασσας.

2.4.3 Εξισώσεις ροής

Η ροή υπόγειων υδάτων πρέπει να ικανοποιεί την εξίσωση της συνέχειας, δηλαδή ένα νόμο διατήρησης. Στη προκειμένη περίπτωση έχουμε

$$\frac{\partial(\rho v_1)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_2)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_3)}{\partial z} = -\frac{\partial(\rho n)}{\partial t}. \quad (2.28)$$

Ο όρος $\frac{\partial(\rho n)}{\partial t}$ εκφράζει τη μεταβολή της μάζας του νερού λόγω διαστολής ή συμπίεσης, δηλαδή αλλαγή της πυκνότητας ρ , ή λόγω συμπίεσης του πορώδους υλικού,



Σχήμα 2.14: Υδραυλική ανύψωση.

οπότε έχουμε και μεταβολή του πορώδους. Συγκεκριμένα έχουμε

$$\frac{\partial(\rho n)}{\partial t} = n \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial n}{\partial t} = \rho S_c \frac{\partial h}{\partial t}, \quad (2.29)$$

όπου

S_c : ειδική υδροχωρητικότητα, $S_c = \rho g(\alpha + n\beta)$ ($[S_c] = L^{-1}$),

α : συμπιεστότητα υδροφόρου στρώματος ($[\alpha] = LT^2M^{-1}$),

β : συμπιεστότητα ρευστού ($[\beta] = M^{-1}LT^2$),

Χρησιμοποιώντας την εξίσωση (2.29) και αντικαθιστώντας την στη (2.28) έχουμε

$$\frac{\partial(\rho v_1)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_2)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_3)}{\partial z} = -\rho S_c \frac{\partial h}{\partial t}.$$

Θεωρώντας ότι οι μεταβολές στη πυκνότητα είναι αμελητέες έχουμε

$$\frac{\partial \rho}{\partial x}, \frac{\partial \rho}{\partial y}, \frac{\partial \rho}{\partial z} \ll 1$$

και επομένως

$$\rho \frac{\partial v_1}{\partial x} + \rho \frac{\partial v_2}{\partial y} + \rho \frac{\partial v_3}{\partial z} = \rho S_c \frac{\partial h}{\partial t}.$$

Διαιρώντας με ρ όλους τους όρους και χρησιμοποιώντας το νόμο του Darcy παίρνουμε

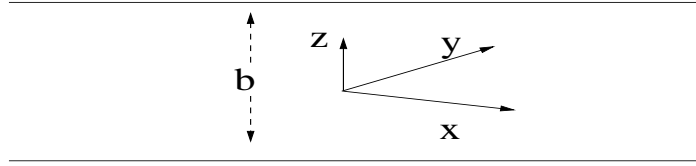
$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_1 \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_2 \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_3 \frac{\partial h}{\partial z} \right) = S_c \frac{\partial h}{\partial t}.$$

Στη περίπτωση που η ροή είναι ομογενής και ιστροπική, δηλαδή $K_1 = K_2 = K_3$ σταθερές, η εξίσωση γίνεται

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = \frac{S_c}{K} \frac{\partial h}{\partial t}.$$

Ορίζουμε τη σταθερά S , το συντελεστή αποθηκευτικότητας, σε ένα υδροφόρο στρώμα πάχους b ως $S = S_s b$ και τη σταθερά μετάβιβασιμότητας $T = Kb$ οπότε η εξίσωση γίνεται

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = \frac{S}{T} \frac{\partial h}{\partial t}.$$



Σχήμα 2.15: Απλοποίηση του χωρίου σε δύο διαστάσεις.

Επίσης η ποσότητα $\frac{\partial^2 h}{\partial z^2}$ μπορεί να απαλειφθεί εάν θεωρήσουμε ότι $\frac{\partial h}{\partial z}(x, y, 0) = \frac{\partial h}{\partial z}(x, y, b) = 0$ και χρησιμοποιήσουμε τη μεταβλητή $\bar{h} = \int_0^b h dz$ ή απλά αν υποθέσουμε ότι $K_1, K_2 \gg 1$. Έτσι η εξίσωση, χρησιμοποιώντας σε κάθε περίπτωση το συμβολισμό $h = h(x, y)$ για λόγους απλότητας, γίνεται

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = \frac{S}{T} \frac{\partial h}{\partial t}. \quad (2.30)$$

Στη περίπτωση που ενδιαφερόμαστε για τη στάσιμη κατάσταση, ή για μία χρονική κλίμακα σχετικά μικρή σε σχέση με το χρόνο κίνησης του ρευστού, παίρνουμε το στάσιμο πρόβλημα

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = 0. \quad (2.31)$$

Για τις εξισώσεις (2.30), (2.31) πρέπει να θέσουμε κατάλληλες συνοριακές και αρχικές συνθήκες.

Η επίλυση τους όταν οι συνοριακές συνθήκες είναι τέτοιες έτσι ώστε να μην έχουμε αναλυτική λύση μπορεί να γίνει αριθμητικά.

Για παράδειγμα η εξίσωση (2.31) μπορεί να λυθεί με πεπερασμένες διαφορές. Θεωρώντας ένα πλέγμα σε ένα δυοδιάστατο χωρίο και με $h_{i,j} \simeq h(x_i, x_j)$ έχουμε

$$h_{i,j} = \frac{h_{i,j+1} + h_{i,j-1} + h_{i-1,j} + h_{i+1,j}}{4}.$$

Σε περίπτωση που έχουμε ανισότροπη ροή με $K_1 \neq K_2$ το παραπάνω σχήμα παίρνει τη μορφή

$$h_{i,j} = \frac{K_{1_{i,j+1}} h_{i,j+1} + K_{1_{i,j-1}} h_{i,j-1} + K_{2_{i-1,j}} h_{i-1,j} + K_{2_{i+1,j}} h_{i+1,j}}{K_{1_{i,j-1}} + K_{1_{i,j+1}} + K_{1_{i-1,j}} + K_{1_{i+1,j}}}$$

2.4.4 Εξίσωση μεταφοράς μολυσματικού διαλύματος

Για να μοντελοποιήσουμε τη μεταφορά και διάχυση ενός μολυσματικής χημικής ένωσης σε ένα υδροφόρο στρώμα θα χρησιμοποιήσουμε την εξίσωση διάχυσης - μεταφοράς

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(u_i C) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{i,j} \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) \pm \sum_{m=1}^n r_m. \quad (2.32)$$

όπου

C : συγκέντρωση διαλύματος ($[C] = ML^{-3}$),

t : χρόνος ($[t] = T$),

u_i : ταχύτητα υδάτων $i = 1, 2, 3$ ($[u_i] = LT^{-1}$),

x_i : απόσταση, x_1 διαμήκη, x_2 εγκάρσια, x_3 κατακόρυφη ($[x_i] = L$),

$D_{i,j}$: τανυστής διάχυσης (ή διασποράς) ($[D_{i,j}] = L^2 T^{-1}$),

r_m : ρυθμός αντίδρασης, φυσικής ή χημικής ή βιολογικής ($[r_m] = ML^{-3} T^{-1}$).

Αυτή η εξίσωση πρέπει να χρησιμοποιηθεί σε συνδυασμό με την εξίσωση συνέχειας για το προσδιορισμό της υδραυλικής στάθμης h και άρα των ταχυτήτων u_i . Εάν οι συντελεστές της ταχύτητας και της διάχυσης είναι σταθερές και τα στοιχεία της διαγωνίου του τανυστή D είναι τα D_{11}, D_{22}, D_{33} η εξίσωση (2.32) παίρνει τη μορφή

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \left[u_1 \frac{\partial C}{\partial x} + u_2 \frac{\partial C}{\partial y} + u_3 \frac{\partial C}{\partial z} \right] = D_{11} \frac{\partial C}{\partial x^2} + D_{22} \frac{\partial C}{\partial y^2} + D_{33} \frac{\partial C}{\partial z^2} \pm \sum_{m=1}^n r_m,$$

ή

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_i \nabla C = D_{ii} \Delta C \pm \sum_{m=1}^n r_m,$$

Συνήθως αυτή η εξίσωση χρειάζεται να λυθεί για μια η δύο διαστάσεις αφού από την εξίσωση της συνέχειας έχει προσδιοριστεί η ταχύτητα u_i .

Τα D_i προσδιορίζονται πειραματικά. Μια σχέση που διευκολύνει τον προσδιορισμό τους είναι η ακόλουθη

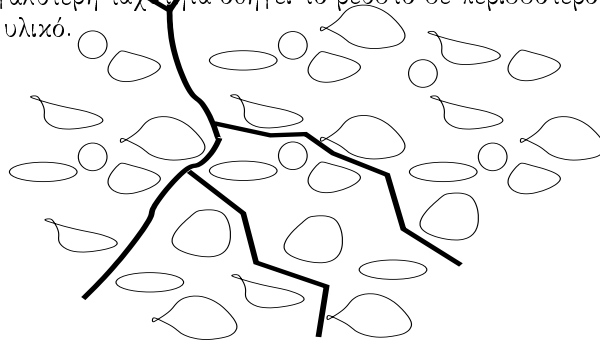
$$D_{11} = a_1 u_1 + D_*, \quad D_{22} = a_2 u_2 + D_*$$

όπου

a_1 : διάμηκες μήκος διασκορπισμού ($[a_1] = L$),

a_2 : εγκάρσιο μήκος διασκορπισμού ($[a_2] = L$),

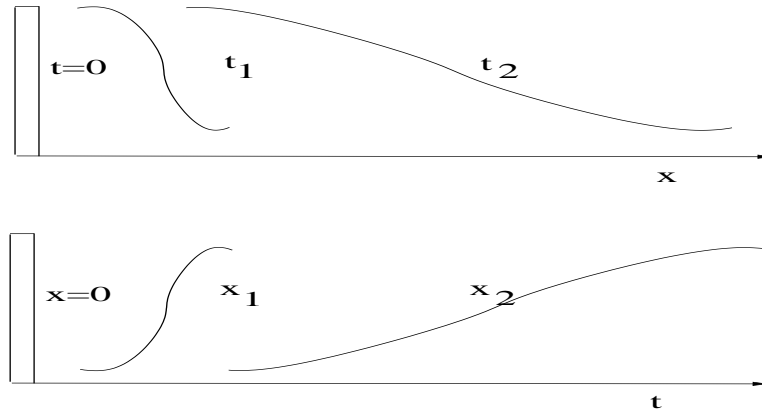
D_* : συντελεστής διάχυσης σωματιδίων ρευστού ($[D_*] = L^2T^{-1}$),
 Αυτές οι σχέσεις εκφράζουν το γεγονός ότι η ροή θα διαχυθεί περισσότερο επειδή μεγαλύτερη ταχύτητα οδηγεί το ρευστό σε περισσότερους διαδρόμους στο πορώδες υλικό.



Σχήμα 2.16: Διάχυση ροής σε πορώδες υλικό.

2.4.5 Ρόφηση, επιβράδυνση και αντιδράσεις

Εάν παρακολουθήσουμε τη συγκέντρωση C καθώς το νερό κινείται ανάμεσα σε δύο σημεία x_1 και x_2 και σε χρόνο t_1 έως t_2 σχηματίζεται μία σιγμοειδή καμπύλη



Σχήμα 2.17: Προφίλ διάχυσης σε διάφορες χρονικές στιγμές και σε διάφορα σημεία.

Βλέπουμε ότι με το χρόνο οι καμπύλες των t_2 και x_2 έχουν μικρότερη κλίση. Αυτό συμβαίνει σε μονοδιάστατο, ομογενές υδροφόρο στρώμα και η εξίσωση για τη συγκέντρωση της μόλυνσης είναι

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_1 \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \pm \sum_{m=1}^n r_m.$$

Μια από τις πιο συνηθισμένες αντιδράσεις που έχουμε είναι αυτή της διάβρωσης του πορώδους υλικού. Οι μηχανισμοί διάβρωσης σχετίζονται με την απορρόφηση οργανικών χημικών ενώσεων, απορρόφηση μετάλλων στην επιφάνεια των σωματιδίων του πορώδους υλικού, ανταλλαγή μεταλλικών ιόντων κτλ. Το ποσό προσροφημένης μάζας στο πορώδες υλικό S δίνεται από τη σχέση $S = k_d C$ όπου $[s_a] = M M^{-1}$, πχ. mg/kg , k_d είναι ο συντελεστής κατανομής και C η συγκέντρωση του διαλύματος. Η εξίσωση διάχυσης μεταφοράς σε αυτή τη περίπτωση γίνεται

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_1 \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial C}{\partial x^2} - \frac{\partial S_a}{\partial t} \rho_s \frac{1-n}{n} \pm \sum_{m=1}^n r_m.$$

όπου

ρ_s : πυκνότητα σωματιδίων ($[\rho_s] = ML^{-3}$),

n : ενεργό πορώδες (αδιάστατο),

r_m : ρυθμός υπολοίπων χημικών ή βιολογικών αντιδράσεων. Πολλές φορές είναι πιο βολικό να χρησιμοποιούμε τη πυκνότητα του πορώδους υλικού, ρ_b σε σχέση με τον συνολικό όγκο που καταλαμβάνει, $\rho_b = \rho_s(1-n)$. Επίσης

$$\frac{\partial S}{\partial t} \frac{\rho_b}{n} = \frac{mg \text{ χημικού}}{kg \text{ στερεού ημέρα}} \frac{Kg \text{ στερεού/Συνολικά } lt}{lt H_2O/\Sigma \text{ συνολικά } lt}.$$

Χρησιμοποιώντας τη σχέση $S = k_d C$ έχουμε

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_1 \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - k_d \frac{\rho_b}{n} \frac{\partial C}{\partial t} \pm \sum_{m=1}^n r_m,$$

ή

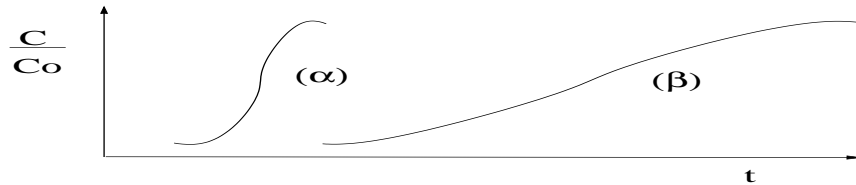
$$\frac{\partial C}{\partial t} \left(1 + k_d \frac{\rho_b}{n}\right) + u_1 \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \pm \sum_{m=1}^n r_m.$$

Ορίζουμε τον αδιάστατο όρο επιβράδυνσης ή υστέρησης R

$$R = 1 + k_d \frac{\rho_b}{n} = 1 + k_d \rho_s \frac{(1-n)}{n},$$

και έχουμε

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{u_1}{R} \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{D}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{K}{R} C, \quad (2.33)$$



Σχήμα 2.18: Προφίλ διάχυσης σε διάφορες χρονικές στιγμές.

για $\sum_{m=1}^n r_m = -KC$ στη περίπτωση μίας χημικής αντίδρασης πρώτης τάξης, όπου K είναι η σταθερά της αντίδρασης (σταθερά αποικοδόμησης). Ο όρος επιβράδυνσης έχει σαν αποτέλεσμα τη καθυστέρηση της διαδικασίας.

Για την εξίσωση (2.33) μια λογική και πιθανή εκδοχή των συνθηκών που πρέπει να θέσουμε είναι

$$C(0, t) = C_0, \quad t > 0, \quad \frac{\partial C}{\partial x} \rightarrow 0, \quad x \rightarrow \infty,$$

$$C(x, 0) = 0, \quad x \geq 0.$$

Η λύση της εξίσωσης σε αυτή τη περίπτωση είναι

$$C = \frac{C_0}{2} e^{\left(\frac{u_1 - v}{2D} x\right)} \operatorname{erfc}\left(\frac{Rx - vt}{2\sqrt{DRt}}\right) + \frac{C_0}{2} e^{\left(\frac{u_1 + v}{2D} x\right)} \operatorname{erfc}\left(\frac{Rx + vt}{2\sqrt{DRt}}\right),$$

όπου

$$v = u_1 \left(1 + 4 \frac{KD}{u_1^2}\right)$$

και

$$\operatorname{erfc}(y) = 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n y^{2n+1}}{n!(2n+1)} = 1 - \int_0^y e^{-\eta^2} d\eta.$$

Πολλές φορές η πηγή του μολυσματικού διαλύματος δεν είναι συνεχής και απλά έχουμε μια εκροή μάζας M σε ένα σημείο μια συγκεκριμένη χρονική στιγμή. Τότε οι συνοριακές συνθήκες έχουν τη μορφή

$$\frac{\partial C}{\partial x} \rightarrow 0, \quad x \rightarrow \pm\infty,$$

$$C(x, 0) = \delta(x), \quad x \in \mathbb{R}.$$

Η λύση σε αυτή τη περίπτωση είναι

$$C = \frac{MR}{2A\sqrt{\pi DRt}} e^{\left(-\frac{x - \frac{u_1}{R}t}{4\frac{R}{K}t}\right)} e^{\left(-\frac{K}{R}t\right)}.$$

όπου

M : μάζα εκροής μόλυνσης ($[M] = M$),

A : διατομή ροής ρευστού ($[A] = L^2$).

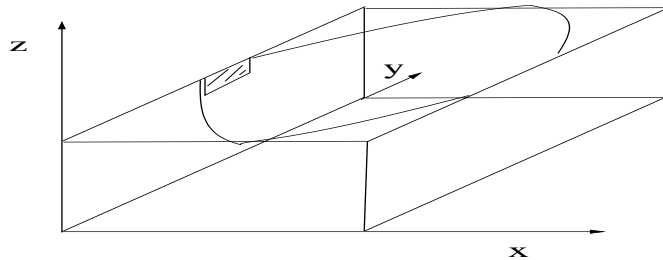
Στη περίπτωση ροής τριών διαστάσεων, με ανάλογες συνοριακές συνθήκες, αν θεωρήσουμε ότι έχουμε κίνηση του υδροφόρου στρώματος μόνο στην οριζόντια κατεύθυνση η εξίσωση έχει τη μορφή

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{u_1}{R} \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{D_1}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{D_2}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{D_3}{R} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \frac{K}{R} C.$$

Η λύση σε αυτή τη περίπτωση έχει τη μορφή

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{8} e^{\frac{u_1}{2D_1} x} \left[1 - \left(\frac{1+4kD_1/u_1}{u_1/R} x \right)^{\frac{1}{2}} \right] \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \frac{u_1}{R} + \left(1 + 4k \frac{D_1 R}{2x^2} \right)^{\frac{1}{2}}}{2 \left(\frac{D_1}{R} t \right)} \right) \\ \cdot \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{y + \frac{Y}{2}}{2 \left(\frac{D_2}{u_1} x \right)^{\frac{1}{2}}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{y - \frac{Y}{2}}{2 \left(\frac{D_2}{u_1} x \right)^{\frac{1}{2}}} \right] \right\} \\ \cdot \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{z + Z}{2 \left(\frac{D_3}{u_1} x \right)^{\frac{1}{2}}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{z - Z}{2 \left(\frac{D_3}{u_1} x \right)^{\frac{1}{2}}} \right] \right\},$$

όπου Y είναι το πλάτος της πηγής των αποβλήτων που προκαλούν μόλυνση και Z είναι το ύψος της πηγής αποβλήτων.



Σχήμα 2.19: Τρισδιάστατο χωρίο.

Οι λύσεις των παραπάνω εξισώσεων μπορούν να παραχθούν με χρήση του μετασχηματισμού Fourier ή με τη χρήση της θεμελιώδους λύσης για ημίαιπρο χωρίο.

2.5 Η εξίσωση πορώδους υλικού

Θεωρούμε ότι έχουμε ένα ισότροπο υλικό, πορώδες και τη ροή μέσα σε αυτό να καθορίζεται από το νόμο του Darcy. Με κατάλληλη κανονικοποίηση έχουμε

$$\vec{v} = -\nabla P,$$

όπου

\vec{v} : το διάνυσμα της ταχύτητας ($[\vec{v}] = LT^{-1}$),

P : πίεση ($[P] = MT^{-2}L^{-1}$).

Η εξίσωση της συνέχειας στη προκειμένη περίπτωση είναι

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho \nabla P),$$

όπου

ρ : η πυκνότητα ($[\rho] = ML^{-3}$), η οποία δεν είναι σταθερή ως προς το χρόνο.

Σε περίπτωση που έχουμε ισόθερμη μεταβολή της ροής, δηλαδή έχουμε αργή ροή, ισχύει ότι η πίεση είναι ανάλογη της πυκνότητας, $P \propto \rho$ ενώ για αδιαβατική μεταβολή, σε περίπτωση που η θερμική αγωγιμότητα δεν είναι μεγάλη, έχουμε ότι η πίεση είναι ανάλογη μίας δύναμης της πυκνότητας δηλαδή $P \propto \rho^\gamma$, με $\gamma > 1$.

Στη περίπτωση αδιαβατικής μεταβολής η εξίσωση της συνέχειας παίρνει τη μορφή

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho^m \nabla \rho),$$

για $m > 0$, $m = \gamma > 1$ ή $m = 1$ ανάλογα με τη περίπτωση, έχουμε

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \rho^m \nabla^2 \rho + m \rho^{m-1} |\nabla \rho|^2,$$

ή χρησιμοποιώντας τη πίεση P για εξαρτημένη μεταβλητή

$$\frac{\partial P}{\partial t} = P \nabla^2 P + \frac{1}{m} |\nabla P|^2.$$

Στις παραπάνω εξισώσεις για τη πίεση ή τη πυκνότητα, για να έχουν φυσικό νόημα αυτές, μας ενδιαφέρουν μόνο θετικές λύσεις, δηλαδή θέλουμε $P > 0$ και $\rho > 0$. Επιπλέον οι εξισώσεις αυτές είναι παραβολικού τύπου και επιδέχονται τις ανάλογες συνοριακές και αρχικές συνθήκες.

Εάν θεωρήσουμε τη περίπτωση που έχουμε ένα μονοδιάστατο χωρίο η εξίσωση για την πυκνότητα γίνεται

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho^m \frac{\partial \rho}{\partial x} \right).$$

Η εξίσωση αυτή επιδέχεται λύσης συγκεκριμένης μορφής. Αυτές ονομάζονται λύσεις του οδεύοντος κύματος, (travelling wave solutions) και έχουν τη μορφή $\rho = \rho(x - ct)$, όπου c σταθερά και $z = x - ct$ η νέα ανεξάρτητη μεταβλητή. Για $\rho = \rho(z)$ η εξίσωση γίνεται

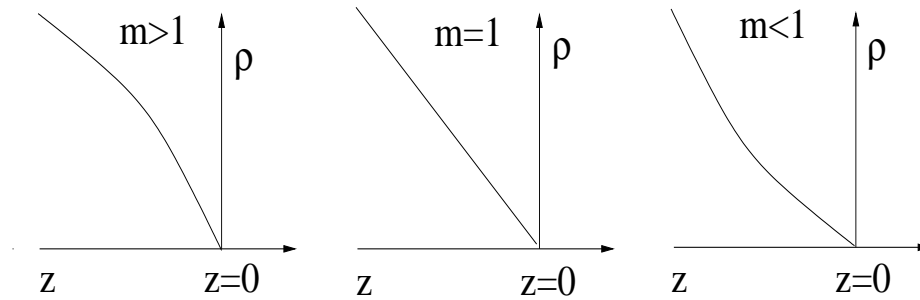
$$\frac{d}{dz} \left(\rho^m \frac{d\rho}{dz} \right) + c \frac{d\rho}{dz} = 0.$$

για $\rho' = \frac{d\rho}{dz}$ και ολοκληρώνοντας έχουμε

$$\rho^m \rho' + c\rho = C,$$

όπου C κάποια σταθερά. Θέλουμε να έχουμε θετικές λύσεις, $\rho > 0$ για $z < 0$ και $\rho = 0$ για $z \geq 0$. Από το νόμο διατήρησης, δηλαδή ότι η ροή είναι ίση με $-\rho^m \nabla \rho$, έχουμε ότι η ποσότητα $\rho^m \rho'$ είναι συνεχής και $\rho^m \rho' = 0$ για $z = 0$.

Η γραφική παράσταση της λύσης θα έχει τη μορφή μίας καμπύλης η οποία είναι κοίλη για $m > 1$, κυρτή για $m < 1$ και είναι μια ευθεία για $m = 1$.



Σχήμα 2.20: Μορφές της ρ για διάφορες τιμές του m .

Βιβλιογραφία

- [1] Achenson, **Elementary Fluid dynamics**,
- [2] A. A. Lacey, **Mathematical Modelling**, Σημειώσεις παραδόσεων, Edinburgh (1994,2002).
- [3] A. H. Nayfeh, **Introduction to Perturbation Methods**, John Wiley (1973).
- [4] J. D. Logan, **Εφαρμοσμένα Μαθηματικά**, Απόδοση στα ελληνικά Β. Δουγαλής, Δ. Μητσούδης, Ι. Στρατής, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης (2002).
- [5] N. D. Fowkes J. J. Mahoney, **An Introduction to Mathematical Modelling**, John Wiley (1990).
- [6] J.L. Schnoor, **Environmental Modelling**, John Wiley (1996).
- [7] A. B. Tayler, **Mathematical Models in Applied Mechanics**, Oxford University Press (1984).
- [8] Ν. Σταυρακάκης, **Εξισώσεις Μερικών Παραγώγων**, Εκδόσεις Παπασωτηρίου (2000).