Jednačine transporta u diferencijalnoj formi

***Jednačina kontinuiteta za masu***

Za matematičku formulaciju održanja mase posmatrajmo promenu mase u malom vremenskom periodu u kontrolnoj zapremini . Postoje dva načina računanja promene mase. Jedan metod razmatra masu u kontrolnoj zapremini na početku i kraju nekog vremenskog intervala i računa razliku. U drugom metodu se razmatra ravnoteža flukseva čestica kroz granice kontrolne zapremine. Ravnoteža se razmatra u smislu da se fluksevi čestica u zapreminu uzimaju sa znakom plus, a fluksevi koji izlaze iz zapremine sa znakom minus. U trodimenzionom prostoru svih šest stranica kontrolne zapremine se moraju uzimati u obzir.

Prost jedno-dimenzioni slučaj je prikazan na slici niže.





Masa neke supstance koja se nalazi u zapremini je različita na početku i kraju vremenskog intervala. U tom vremenskom intervalu imamo priliv čestica na jednoj strani i odliv na suprotnoj. Grafičke simbole na dnu slike možemo predstaviti matematički. Masa na početku i kraju perioda i može se predstaviti kao:

 i

gde označava udeo u ukupnoj zapremini. U slučaju zasićene porozne sredine označava poroznost. U nezasićenoj zoni, npr, u zemljištu, je zapreminsko zasićenje vodom, kada se razmatra vodena faza. U slučaju kada dva fluida okupiraju prostor (npr, voda i ulje), udeo svake faze se takođe mora uzeti u obzir. je zapremina a je koncentracija merena kao [***masa/zapremina***].

Promena mase po jedinici vremena je data kao:



Fluksevi, kroz poprečne strane kontrolne zapremine u pravcu x-ose (vidi sliku) su date kao:

 i

Fluksevi se mogu menjati i u prostoru i u vremenu kako je to naznačeno u gornjoj jednačini. Oba fluksa su pozitivna ako doprinose uvećanju mase u kontrolnoj zapremini, u suprotnom su negativni. Fizička dimenzija gustine masenog fluksa je . Član predstavlja površinu kroz koju imamo tok.

Balans između dva fluksa je dat kao

 .

Zbog jednostavnosti zanemarićemo sve ostale flukseve kroz preostale četiri strane kontrolne zapremine . Kao što smo gore naveli, obe formule mere promenu mase tako da moraju biti jednake:

Delenjem obe strane gornje jednačine sa zapreminom i poroznošću dobijamo

Od ove jednačine možemo preći ka diferencijalnoj kada konačne male razlike i pređu u beskonačno male tj, i . Sledi:

.

Gornja diferencijalna jednačina pedstavlja princip održanja mase. Ona važi za jedno-dimenzioni transport i predstavlja osnovu za matematičku analizu transportnih procesa. Fizička dimenzija članova u toj jednačini je .

Gornja formula je tačna ako unutra zapremine nema izvora ili ponora za razmatrane bio-geo-hemijske vrste. Izvori i ponori se ovde shvaćaju u najopštijoj formi: svaki proces koji kreira ili uništava datu vrstu doprinosi izvorima ili ponorima.

Matematički gledano, lako ćemo dodati izvore i ponore u gornju jednačinu. Ako ih označimo sa , koji se mogu menjati i u prostoru i vremenu, možemo prosto dodati gornjim jednačinama integral

.

Ovaj izraz pozitivan ako imamo dodavanje mase (izvor), ili negativan ako se masa u kontrolnoj zapremini gubi (ponor). Ako se integralna forma diferencira imamo

što predstavlja opštu transportnu jedno-dimenzionu jednačinu.

Komponente fluksa u i pravcu se takođe mogu uračunati, analogno dobijenoj formuli u pravcu. Fluksevi se uvode na isti način u jednačinu balansa i posmatrajući granični slučaj i dobijamo:

što predstavlja opštu formulu održanja mase u prostoru. Korišćenjem operatora - nabla, gornja jednačina se može napisati u kompaktnijem obliku

Gornji primer se odnosi na fluid, ali princip održanja mase može biti primenjen za bilo koju drugu vrstu čestica. Kada se gustina fluida ne menja tada se promena mase fluida, može predstaviti preko promene zapremine fluida , koji dalje može predstavljati promenu vodene table.

Ova jednačina za održanje mase nije još kompletirana, jer imamo više promenljivih nego jednačina a to su koncentracija i komponente vektora fluksa . Da bi reducirali broj promenljivih koristićemo relaciju između fluksa i koncentracije tako da ćemo na kraju dobiti jednačinu, samo u funkciji koncentracije. Advektivni fluks je dat proizvodom brzine i koncentracije. U trodimenzionom slučaju imamo tri komponente fluksa, određene sa tri komponente brzina:

U vektorskoj notaciji se to može napisati kao:

=.

# Transport

Transport, kao opšti pojam, predstavlja procese koji određuju distribuciju bio-geo-hemijskih vrsta ili toplote u neki deo okoline. Ovde ćemo razmatrati taj pojam u užem smislu, kao interakciju fizičkih procesa sa efektom na neku vrstu ili njene komponente kao i na toplotu. Drugi procesi, koji takođe mogu biti relevantni za okolinu, kao što su sorpcija, degradacija, raspad i druge reakcije različitog tipa, se takođe uzimaju u obzir ali se oni ne tretiraju strogo kao transportni procesi.

Ovi transportni procesi su relevantni u skoro svim ekosistemima. Tansport toplote i mase je zajednička pojava za hidrosferu, pedosferu, atmosferu i u površinskim vodama kao što su reke, jezera i okeani, u podzemnim vodama, sedimentu, zemljištu, kao i u multifaznim i jednofaznim sistemima.

Postoje dva tipa transportnih pojava u užem smislu: *advekcija i difuzija/disperzija*. Advekcija predstavlja transport u najužem smislu reči: čestice se prosto sa tokom fluida pomeraju iz jednog mesta u drugo. Difuzija i disperzija su procesi koji nastaju usled razlike u koncentracijama. U svim sisstemima postoji tendencija izjednačavanja koncentracije. Ako su čestice pokretljive tj, ako imaju mogućnost kretanja sa jednog mesta na drugo, tada će postojati neto difuzioni ili disperzivni fluks i to od lokacija sa velikom koncentracijom ka lokaciji sa malom koncentracijom.

Transportni procesi se opisuju diferencijalnim jednačinama, kombinujući princip održanja mase i Fikov zakon difuzije . Dakle, imamo sada izraz za fluks, ako uračunamo oba efekta (advekciju i difuziju)

.

i tako dobijamo opštu jednačinu transporta

.

Što se tiče transporta toplote imamo diferencijalnu jednačinu gde je temperatura , zavisna promenljiva. Ta jednačina je određena kombinujući zakon održanja energije i Furijerov zakon prenosa toplote. Sa matematičke tačke gledišta radi se o istoj diferencijalnoj jednačini sa različitim fizičkim značenjima za koeficijente. Dakle, generalno govoreći održanje neke veličine , (mase, impulsa, energije) se opisuje sa istom jednačinom kontinuiteta kako smo je već gore izveli. Održanje veličine , koja zavisi od vremena i tri prostorne koordinate i , je kvantitativno iskazana diferencijalnom jednačinom:

gde , i reprezentuje flukseve u tri pravca u prostoru. Tri komponente fluksa čine vektor fluksa i određuju tri pravca u prostoru. U članu su uračunati svi izvori i ponori tj, ako je pozitivan imamo izvor u momentu i na poziciji a ako je negativan imamo ponor.

Jednačina kontinuiteta nam govori o tome da promena te veličine zavisi od budžeta lokalnih flukseva.Ta jednačina kontinuiteta je izvedena iz budžeta kontrolne zapremine tj, konačne zapremine malih dimenzija (3D prostor).

U malom ali konačnom vremenskom intervalu , promena veličine u jedinici zapremine je od do , a ukupna promena veličine u kontrolnoj zapremini je . Sa druge strane, ukupan budžet može da se prikaže preko flukseva, izvora i ponora. Duž svake prostorne dimenzije imaju dve površine kroz koje masa, impuls ili energija ulaze ili napuštaju kontrolnu zapreminu, što se izražava preko određene komponente fluksa. Naći vezu između koncentracije i fluksa je lako za advektivni transport, dok kod difuzionog/disperzivnog fluksa moramo da uvedemo empirijsku vezu kao što je Fikov zakon difuzije.

###### Zakon konzervacije mase u diferencijalnom obliku

U ovom slučaju razmatramo diferencijalni element koji je fiksiran u oblasti toka (slika niže). To je takozvani Ojlerov koordinatni sistem.



 ***Zapreminski element za određivanje zakona održanja mase u diferencijalnom obliku***

Na slici se vidi element male zapremine čije su stranice i . Sada ćemo na isti način da odredimo ulazni i izlazni maseni fluks u ovu zapreminu. Ako npr., posmatramo pravac, imamo da je maseni transport kroz levi presek zapreminskog elementa prosto . Da bi odredili član koji opisuje kako masa napušta zapreminski element na desnoj strani moramo iskoristiti *Tejlorovu teoremu* koja nam aproksimira vrednost funkcije u jednoj tački ako nam je poznata njena vrednost u susednoj bliskoj tački (slika niže). To znači da vrednost funkcije u tački može biti ocenjeno znajući vrednost u , ako je dovoljno malo kao:



***Slika 5. Grafička demonstracija razvijanja funkcije u Tejlorov red***

Koristeći ovu ideju možemo predstaviti transfer mase kroz desni presek elementarne zapremine kao:

Dalje, treba primetiti kada teži nuli, članovi višeg reda u Tejlorovom redu se još „brže“ približavaju nuli tako da ih možemo zanemariti. To je klasičan manevar u primenjenoj matematici i inžinjerstvu . Pošto postaje manje i postaju bliži i potrebno je manji broj članova reda da ocenimo znajući .

Ostavljajući, dakle, samo prva dva člana u Tejlorovom redu dobijamo izraz za razliku transfera masa na levom i desnom preseku elementarne zapremine kao:

Množeći članove u zagradama dobijamo:

i opet zanemarujući član sa , kao veličinu koja „brže“ teži nuli od dobijamo konačno

Brzina akumulacije u zapreminskom elementu je prosto:

Ako sada ponovimo transfer mase i za ostala dva para preseka elementarne zapremone, tj, za pravce i , i zamenimo članove u donjoj jednačini sa dobijenim matematičkim izrazima:

dobijamo:

Ili u kompaktnijoj vektorskoj notaciji:

 Proveriti!

Gornja jednačina se uprošćava u slučaju kada je ρ=const (nestišljivi fluid) i dobija oblik:

**=**0

Što je u stvari *jednačina kontinuiteta* u mehanici fluida.

Da bi dobili diferencijalnu jednačina za koncentraciju , posmatraćemo neku proizvoljnu zapreminu Isticanje zagađivača iz te zapremine je dato sa Konzervacija broja čestica zagađivača diktira da se za toliko mora smanjiti koncentracija u zapremini tj, . Prema tome imamo:

Ova jednačina važi za bilo koju zapreminu fiksiranu u prostoru. Ako izjednačimo podintegralne članove dobijamo poznatu *jednačinu kontinuiteta:*

Ako se zagađivač nalazi u sredini koja se kreće sa nekom brzinom gustina fluksa tada ima još jednu komponentu pošto se zagađivač kreće zajedno sa sredinom. Ta pojava se zove *advekcija.* Zajedno sa difuzijom to daje:

Ili kada zamenimo u gornju jednačinu:

Dalje imamo:

Ako nema izvora i ponora u sredini tada je , i ako koeficijent difuzije ne zavisi od pozicije imamo:

Na levoj strani imamo parcijalni izvod koncentracije po vremenu što predstavlja promenu koncentracije na određenom mestu Ako posmatramo kako se koncentracija menja sa vremenom ako je sistem vezan za tok, imamo da je , gde je vremenska zavisnost takva da je =, slično i Dakle, promena koncentracije sa vremenom, prateći tok je:

Na levoj strani je totalni izvod koncentracije po vremenu. A član opisuje promenu koncentracije zagađivača koji se transportuje sa tokom tj, advekcijom.

Zamenom u gornju formulu imamo prost matematički izraz:

Rešavanje ove jednačine zavisi od početnih i graničnih uslova.

Na primer, posmatrajmo homogenu sredinu koja miruje. Dalje uzmimo da je samo funkcija od i i da ne zavisi od i Tada se gornja jednačina uprošćava na