



ΟΔΥΣΣΕΥΣ

NAMA

ΕΜΠ

ΔΕΥΑΚ

ΑΕΙΦΟΡΙΚΗ

MDS



Γ' Κοινοτικό Πλαίσιο Στήριξης 2000-2006  
Επιχειρησιακό Πρόγραμμα Ανταγωνιστικότητα

ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΗ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗ ΥΔΑΤΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΣΕ  
ΣΥΖΕΥΞΗ ΜΕ ΕΞΕΛΙΓΜΕΝΟ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΣΥΣΤΗΜΑ

ΟΔΥΣΣΕΥΣ

Τεύχος 8β

Θεωρητική τεκμηρίωση του μοντέλου δίαιτας  
ρύπων σε υδατορεύματα

*Ε. Ρώμας, Κ. Νουτσόπουλος, Α. Ανδρεαδάκης, Δ. Μαμάης*

Αθήνα  
Δεκέμβριος  
2006

## Συνεργαζόμενοι φορείς



NAMA Σύμβουλοι Μηχανικοί και Μελετητές Α.Ε.



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Τομέας Υδατικών Πόρων  
Υδραυλικών και Θαλάσσιων Έργων



Δημοτική Επιχείρηση Ύδρευσης και Αποχέτευσης  
Καρδίτσας



Αειφορική Δωδεκανήσου Α.Ε.



Άδωνις Κοντός και ΣΙΑ Ε.Ε. (Marathon Data Systems)

## Ενότητα Εργασίας 3

**Ανάπτυξη δέσμης μαθηματικών μοντέλων για την  
ανάλυση, εκτίμηση και προσομοίωση των  
συνιστωσών διαχείρισης των υδατικών πόρων**

## Τεύχος 8β

**Θεωρητική τεκμηρίωση του μοντέλου δίαιτας ρύπων  
σε υδατορεύματα**

## **ΠΕΡΙΛΗΨΗ**

Ο «Ηριδανός» είναι ένα μοντέλο το οποίο εξετάζει τη διαίτα των σημαντικότερων ρύπων που χαρακτηρίζουν την ποιοτική κατάσταση ενός υδατορεύματος. Το μοντέλο χωρίζεται σε τρία υπομοντέλα τα οποία εκτελούνται διαδοχικά σε κάθε χρονικό βήμα. Το πρώτο είναι ένα μονοδιάστατο υδροδυναμικό μοντέλο που επιλύει τις πλήρεις εξισώσεις St. Venant με σκοπό την πρόβλεψη του πεδίου ταχυτήτων και του βάθους ροής. Το δεύτερο υπομοντέλο επιλύει την εξίσωση μεταγωγής – διασποράς για την εύρεση των συγκεντρώσεων ενός συντηρητικού ρύπου κατά μήκος του υδατορεύματος. Το τρίτο είναι ένα ποιοτικό υπομοντέλο το οποίο περιγράφει με απλές μαθηματικές εξισώσεις τις σπουδαιότερες φυσικές, βιολογικές και χημικές διεργασίες που λαμβάνουν χώρα στην υδάτινη στήλη, μεταξύ των οποίων η ανάπτυξη και ο θάνατος των ετεροτροφικών οργανισμών και των αλγών, η νιτροποίηση μέσω της ανάπτυξης νιτροποιητικών οργανισμών σε δύο στάδια, η υδρόλυση ο φυσικός επαναερισμός κ.α. Με αυτό τον τρόπο προσδιορίζεται σε κάθε χρονική στιγμή η συγκέντρωση κάθε ρύπου κατά μήκος του υδατορεύματος. Οι ρύποι που εξετάζονται στο μοντέλο είναι διάφορες μορφές αζώτου και φωσφόρου, το διαλυμένο οξυγόνο, η ετεροτροφική βιομάζα, τα άλγη, συντηρητικοί ρύποι κ.α. Το παρών αποτελεί το τεύχος θεωρητικής τεκμηρίωσης του μοντέλου «Ηριδανός».

## **ABSTRACT**

“Heridanos” is a water quality model which examines the fate of most important pollutants in a river. The model comprises three separate submodels, running successively at each time step. The first module solves the full one-dimensional St. Venant equations, in order to determine the flowing conditions, that is, the velocity and the water depth. The second submodel solves the advection-dispersion equation in order to account for the transport phenomena of dissolved substances along the river. The third is a water quality submodel which describes with simple equations, the main physical, chemical and biological processes taking place in the water column, like growth, respiration and death of heterotrophic organisms and algae, nitrification through the growth of two-stage nitrifiers, hydrolysis and reaeration. The model is able to predict at each time step, the concentration of every substance along the river. The substances being modeled are several forms of nitrogen and phosphorus, dissolved oxygen, heterotrophic biomass, algae and conservative substances. This report is the scientific documentation of the model “Heridanos”.



<b>1</b>	<b>Το μοντέλο διαίτας ρύπων «Ηριδανός»</b>	<b>1</b>
1.1	Εισαγωγή .....	1
1.2	Διεθνής ανασκόπηση .....	1
1.2.1	DHI Software .....	2
1.2.2	Delft 3D.....	3
1.2.3	SOBEK.....	4
1.2.4	Συμπεράσματα .....	5
<b>2</b>	<b>Δομή μοντέλου</b>	<b>7</b>
<b>3</b>	<b>Υδροδυναμικό μοντέλο</b>	<b>9</b>
3.1	Διαφορικές εξισώσεις ασταθούς ροής σε ανοιχτούς αγωγούς .....	10
3.2	Εξίσωση συνέχειας.....	12
3.3	Εξίσωση ορμής .....	14
3.4	Μέθοδος επίλυσης .....	15
3.5	Οριακές συνθήκες.....	16
3.6	Ευστάθεια .....	16
<b>4</b>	<b>Μοντέλο μεταγωγής – διασποράς</b>	<b>19</b>
4.1	Μέθοδος επίλυσης .....	19
4.2	Οριακές συνθήκες.....	20
4.3	Ευστάθεια .....	21
<b>5</b>	<b>Ποιοτικό Μοντέλο</b>	<b>23</b>
5.1	Δομή ποιοτικού υπομοντέλου.....	23
5.2	Παραδοχές .....	23
5.3	Ουσίες που εξετάζονται στο μοντέλο .....	25
5.4	Διεργασίες του ποιοτικού μοντέλου .....	26
<b>6</b>	<b>Παράρτημα</b>	<b>35</b>
6.1	Εξισώσεις στοιχειομετρικών συντελεστών .....	35
6.2	Προτεινόμενες τιμές παραμέτρων του μοντέλου .....	42



## Πίνακας σχημάτων

Σχήμα 1: Το υπολογιστικό πλέγμα.....	12
Σχήμα 2: Τυπική διατομή.....	13
Σχήμα 3: Ο υπολογιστικός όγκος για την επίλυση της εξίσωσης μεταγωγής – διασποράς .....	19
Σχήμα 4: Σύγκριση μοντέλου – αναλυτικής λύσης στην περίπτωση απότομου ορίου ( $Cr=0.9$ ) .....	22
Σχήμα 5: Σύγκριση μοντέλου – αναλυτικής λύσης στην περίπτωση απότομου ορίου ( $Cr=0.25$ ) .....	22
Σχήμα 6: Επίδραση της ηλιακής ακτινοβολίας στην ταχύτητα της ανάπτυξης των αλγών .....	32





## Πίνακας πινάκων

Πίνακας 1: Παραδείγματα στοιχείων που περιέχονται στο κλάσμα μάζας 'α' .....	25
Πίνακας 2: Ποιοτικός στοιχειομετρικός πίνακας των διεργασιών που εξετάζονται στο μοντέλο .....	26
Πίνακας 3: Στοιχειομετρικές παράμετροι του μοντέλου.....	27
Πίνακας 4: Κινητικές παράμετροι του μοντέλου .....	28
Πίνακας 5: Στοιχειομετρικοί συντελεστές του μοντέλου.....	35
Πίνακας 6: Κλάσματα μάζας των οργανικών ουσιών του μοντέλου .....	42
Πίνακας 7: Τιμές στοιχειομετρικών παραμέτρων του μοντέλου .....	43
Πίνακας 8: Τιμές κινητικών παραμέτρων του μοντέλου.....	43



# 1 Το μοντέλο δίαιτας ρύπων «Ηριδανός»

---

## 1.1 Εισαγωγή

Στα πλαίσια υλοποίησης του ερευνητικού προγράμματος με τίτλο ‘Ολοκληρωμένη Διαχείριση Υδατικών Συστημάτων σε Σύζευξη με Εξελιγμένο Υπολογιστικό Σύστημα (ΟΔΥΣΣΕΥΣ)’ και ειδικότερα της Ενότητας Εργασίας 3, η ερευνητική ομάδα του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου συνέταξε το παρόν τεύχος αναφορικά με την ανάπτυξη του μοντέλου δίαιτας ρύπων σε υδατορεύματα.

Ο στόχος της παρούσας εργασίας είναι η ανάπτυξη ενός μαθηματικού μοντέλου για την εκτίμηση της ποιοτικής κατάστασης των υδάτων ενός ποταμού σε συνάρτηση με τα διάφορα σενάρια λειτουργίας του.

Το **πρώτο κεφάλαιο** περιλαμβάνει μια γενική εισαγωγή όπου γίνεται μία σύντομη παρουσίαση των στόχων της Ενότητας Εργασίας 3 του παρόντος ερευνητικού προγράμματος, καθώς επίσης και μια συνοπτική περιγραφή των σημαντικότερων εμπορικών πακέτων ποιότητας υδατίνων σωμάτων.

Το **δεύτερο κεφάλαιο** αναφέρεται στη γενική δομή του μαθηματικού μοντέλου και στα επιμέρους μοντέλα που το απαρτίζουν.

Στο **τρίτο κεφάλαιο** παρουσιάζεται το υδροδυναμικό μοντέλο με το οποίο γίνεται η εύρεση των χαρακτηριστικών της ροής. Αναφέρονται οι βασικές εξισώσεις που διέπουν τη μονοδιάστατη ροή με ελεύθερη επιφάνεια, η εξίσωση συνέχειας και η εξίσωση ορμής, καθώς και το αριθμητικό σχήμα το οποίο χρησιμοποιείται για την επίλυση τους.

Το **τέταρτο κεφάλαιο** αναφέρεται στο υπομοντέλο που εξετάζει τα φαινόμενα μεταφοράς ρύπων σε υγρό περιβάλλον. Γίνεται περιγραφή της εξίσωσης μεταγωγής – διασποράς όπως επίσης και του αριθμητικού σχήματος που εφαρμόζεται για την επίλυση της.

Τέλος στο **πέμπτο κεφάλαιο** γίνεται περιγραφή του ποιοτικού μοντέλου και των φυσικών, χημικών και βιολογικών διεργασιών που λαμβάνουν χώρα στην υγρή στήλη. Παρουσιάζονται επίσης οι ρύποι που εξετάζονται από το μοντέλο και παρατίθενται οι κινητικές εξισώσεις όλων των διεργασιών.

## 1.2 Διεθνής ανασκόπηση

Ένα από τα πρώτα βήματα της ανάπτυξης του μοντέλου δίαιτας ρύπων σε υδατορεύματα ήταν η έρευνα αγοράς και η ανασκόπηση της διεθνούς βιβλιογραφίας. Όπως είναι γνωστό υπάρχουν εταιρίες, οι οποίες δραστηριοποιούνται εδώ και δεκαετίες στην ανάπτυξη εμπορικών πακέτων για την ποιότητα υδατίνων σωμάτων όπως η δανέζικη DHI ([www.dhisoftware.com](http://www.dhisoftware.com)) ή ολλανδική Delft ([www.wldelft.nl](http://www.wldelft.nl)).

Τα διάφορα εμπορικά πακέτα περιλαμβάνουν πληθώρα ξεχωριστών υπομοντέλων που εστιάζουν σε συγκεκριμένους τομείς της διαχείρισης των υδάτινων πόρων. Συνήθως τα ποιοτικά υπομοντέλα, τα οποία προσδιορίζουν τις μεταβολές στη συγκέντρωση ρύπων λόγω διάφορων φυσικών ή βιολογικών διεργασιών, συνεργάζονται με κάποιο υδροδυναμικό υπομοντέλο της ίδιας εταιρίας, το οποίο επιτρέπει την εύρεση των χαρακτηριστικών της ροής (πεδία ταχυτήτων, βάθη ροής) και την περιγραφή των φαινομένων μεταφοράς και διασποράς ύλης σε υγρό περιβάλλον. Η δομή αυτή ακολουθήθηκε και στο παρόν μοντέλο στο οποίο, όπου τρία υπομοντέλα εκτελούνται παράλληλα για τον υπολογισμό του πεδίου ταχυτήτων, της μεταφοράς ύλης και των βιολογικών διεργασιών. Στις επόμενες παραγράφους γίνεται μια αδρομερής περιγραφή των κυριότερων χαρακτηριστικών τριών γνωστών εμπορικών πακέτων για τη διαχείριση υδάτων, από τα οποία εξάχθηκαν πολύτιμα συμπεράσματα για την ανάπτυξη του παρόντος μοντέλου.

### 1.2.1 DHI Software

Το γνωστό εμπορικό πακέτο MIKE της εταιρίας DHI, παρέχει ανάλογα με τον επιθυμητό βαθμό ακρίβειας μονοδιάστατα (MIKE11), διδιάστατα (MIKE21) και τρισδιάστατα (MIKE3) υδροδυναμικά μοντέλα.

Το MIKE11 χρησιμοποιεί τις μονοδιάστατες εξισώσεις ροής Saint-Venant τις οποίες επιλύει μέσω του αριθμητικού σχήματος Abbott Ionescu. Για ποτάμια μικρού σχετικά πλάτους η θεώρηση ότι η ροή στο ποτάμι μπορεί να περιγραφεί ικανοποιητικά από τη μέση ταχύτητα ροής σε κάθε διατομή, δεν εμπεριέχει σημαντικό σφάλμα και έτσι η χρήση ενός μονοδιάστατου υδροδυναμικού μοντέλου δίνει αποτελέσματα ικανοποιητικής ακρίβειας. Σε περιπτώσεις όμως που το πλάτος του ποταμού φτάνει σε αρκετές εκατοντάδες μέτρα τότε είναι απαραίτητη ή χρήση διδιάστατου ή ακόμη και τρισδιάστατου υδροδυναμικού μοντέλου. Σε αυτές τις περιπτώσεις χρησιμοποιούνται εξελιγμένοι αλγόριθμοι και καμπύλα υπολογιστικά πλέγματα έτσι ώστε να είναι δυνατή η περιγραφή της μαιανδρικής και της ελικοειδούς ροής. Αυτά τα χαρακτηριστικά τα καθιστούν κατάλληλα για τη μελέτη της μορφολογίας του πυθμένα και των πρηνών, μέσω της προσομοίωσης της διάβρωσης του πυθμένα και των πρηνών, της δημιουργία υφάλων, της απόθεση υλικών σε περιοχές όπου η ροή επηρεάζεται από υδραυλικές κατασκευές, καθώς και της μεταφορά όλων των ειδών των ιζημάτων, από λεπτόκοκκα υλικά μέχρι χαλίκια.

Βέβαια σε αυτή την περίπτωση απαιτείται και η λεπτομερέστερη περιγραφή των γεωμετρικών χαρακτηριστικών του ποταμού ενώ οι πολύπλοκοι αριθμητικοί αλγόριθμοι που χρησιμοποιούνται για την επίλυση της ροής σε δύο ή τρεις διαστάσεις επιβαρύνουν πολύ τον υπολογιστικό χρόνο.

Σε όλα τα πακέτα υπάρχει η δυνατότητα επίλυσης ενός δικτύου ποταμών, ενώ ο χρήστης μπορεί να προσομοιώσει ένα μεγάλο αριθμό κατασκευών όπως υπερχειλιστές, αναβαθμούς, βάθρα γεφυρών, οχετούς ή και μεγαλύτερες κατασκευές όπως φράγματα.

Όσον αφορά το ποιοτικό υπομοντέλο, το πιο απλό από αυτά περιλαμβάνει την προσομοίωση τριών μόνο παραμέτρων της θερμοκρασίας του διαλυμένου οξυγόνου και του BOD. Οι διεργασίες που λαμβάνονται υπόψη σε αυτή την περίπτωση είναι η ανανέωση του διαλυμένου οξυγόνου λόγω φυσικού επαναερισμού και η κατανάλωση του κατά την αποδόμηση του BOD. Σε επόμενο επίπεδο προστίθεται ρύποι όπως το αμμωνιακό και νιτρικό άζωτο και διεργασίες όπως η νιτροποίηση και η απονιτροποίηση. Εξετάζονται επίσης με κάποιες απλές ρουτίνες η καθίζηση και η επαναώρηση

ρύπων από τον πυθμένα χωρίς τη σύνθεση όμως χωριστού υπομοντέλου πυθμενικών αποθέσεων. Σε επόμενα επίπεδα πολυπλοκότητας προστίθενται ρύποι όπως ολικός φώσφορος, περιττωματικά και ολικά κολοβακτηρίδια, COD, pH και αλατότητα.

Το πιο αναλυτικό ποιοτικό μοντέλο της DHI το Ecolab είναι στην ουσία ένα εξειδικευμένο οικολογικό μοντέλο το οποίο εξετάζει πολύ μεγάλο αριθμό μεταβλητών (25 κύριες και 79 βοηθητικές) και προσομοιώνει 100 διεργασίες. Η πολυπλοκότητα του μοντέλου αντανακλάται και στο πλήθος των παραμέτρων που καλείται να ορίσει ο χρήστης και οι οποίες ξεπερνούν τις 120.

Σε αυτό το μοντέλο εξετάζονται ρύποι όπως φυτοπλαγκτόν, ζωοπλαγκτόν, μακροάλγη, βλάστηση πυθμένα κ.α., ενώ υπάρχει δυνατότητα πρόβλεψης συγκεντρώσεων ορισμένων ρύπων (οργανικό άζωτο, αμμωνία, νιτρικό άζωτο, φώσφορος) στο ίζημα του πυθμένα. Επίσης μέσω ξεχωριστού υπομοντέλου προσομοιώνονται τα βαρέα μέταλλα και υπολογίζονται οι συγκεντρώσεις τους στην υγρή στήλη, στο ίζημα και στη βλάστηση του πυθμένα και στους έμβιους οργανισμούς.

### 1.2.2 Delft 3D

Το εμπορικό πακέτο Delft 3D της ολλανδικής εταιρία Delft Hydraulics διαθέτει και αυτό μια ανάλογη διαβάθμιση πολυπλοκότητας και στα υδροδυναμικά και στα ποιοτικά υπομοντέλα. Το υπομοντέλο FLOW του Delft3d είναι ένα διδιάστατο ή τρισδιάστατο υδροδυναμικό μοντέλο προσομοίωσης που υπολογίζει ασταθή ροή και φαινόμενα μεταφοράς ύλης. Το σχήμα επίλυσης περιλαμβάνει καμπύλο υπολογιστικό πλέγμα και η επίλυση των εξισώσεων γίνεται με χρήση διαφόρων πολύπλοκων αριθμητικών μεθόδων. Υπάρχουν επίσης εξειδικευμένα υπομοντέλα για τη μεταφορά συνεκτικών ή μη ιζημάτων, για τη διάβρωση και την απόθεση υλικού, για τη επίδραση του ανέμου, τη δημιουργία κυμάτων κ.α.

Σε περιπτώσεις εκβολής ποταμών, σημαντικό ρόλο διαδραματίζουν τα φαινόμενα της παλίρροιας, της διείσδυσης του θαλασσινού νερού και της μεταβολής της μορφής του δέλτα, τα οποία προσομοιώνονται μέσω ειδικών υπομοντέλου.

Το ποιοτικό υπομοντέλο WAQ της εταιρίας αποτελεί ένα γενικό ποιοτικό μοντέλο ικανό να προσομοιώσει ένα μεγάλο πλήθος διεργασιών για όλων των ειδών τα υδάτινα σώματα. Το υδάτινο σώμα που μπορεί να είναι μονοδιάστατο, διδιάστατο ή τρισδιάστατο χωρίζεται σε όγκους ή τμήματα ελέγχου στα οποία επιλύονται οι εξισώσεις μεταφοράς, διασποράς και χημικών ή βιολογικών διεργασιών μέσω εξελεγμένων αριθμητικών τεχνικών.

Το Delft 3D WAQ είναι κατάλληλο για ένα μεγάλο πλήθος εφαρμογών όπως

- Βιοχημικές αντιδράσεις (αποδόμηση BOD, νιτροποίηση)
- Ανάπτυξη ζωοπλαγκτόν και αλγών και κύκλος θρεπτικών
- Ανταλλαγή ουσιών με την ατμόσφαιρα (οξυγόνο, πτητικές οργανικές ουσίες, θερμοκρασία)
- Προσρόφηση και αποβολή βαρέων μετάλλων και οργανικών μικρορυπαντών
- Απόθεση προσροφημένων ουσιών στο ίζημα του πυθμένα και επαναιώρηση από αυτόν
- Θάνατος βακτηριδίων

Το μοντέλο προσομοιώνει πάνω από 140 ουσίες όπως:

- Αλατότητα, διαλυμένο οξυγόνο και BOD

- Περιττωματικά κολοβακτηρίδια
- Οργανικό άνθρακα, άζωτο και φώσφορο στην υγρή στήλη και σε κάθε στρώση του πυθμένα
- Αμμωνιακό και νιτρικό άζωτο, 4 κλάσματα ανόργανου φωσφόρου και πυρίτιο
- Αιωρούμενα στερεά
- 3 είδη αλγών (diatoms, greens, bluegreens) στην υγρή στήλη και στο ίζημα
- Κάδμιο, χαλκό, ψευδάργυρο, υδράργυρο, νικέλιο, μόλυβδο κ.α. στο νερό και στις στρώσεις του πυθμένα

Όσες διεργασίες αφορούν τον πυθμένα γίνονται μέσω ειδικού υπομοντέλου το οποίο προσομοιώνει 3 στρώσεις ιζήματος.

Ο αριθμός των παραμέτρων του μοντέλου στην πλήρη του μορφή ανέρχεται σε αρκετές εκατοντάδες.

Το Delft 3D WAQ μπορεί να συνεργαστεί με τα διδιάστατα και τρισδιάστατα υδροδυναμικά μοντέλα της ίδιας εταιρίας (Delft3D-FLOW) για τον υπολογισμό των υδροδυναμικών χαρακτηριστικών των υδάτινων σωμάτων και των φαινομένων μεταφοράς ύλης λόγω μεταγωγής και διασποράς.

Το ποιοτικό μοντέλο Delft3D-ECO είναι παρόμοιο με το γενικό ποιοτικό μοντέλο WAQ, διαθέτει όμως πιο λεπτομερή περιγραφή του φαινομένου του ευτροφισμού καθώς μπορεί να προσομοιώσει πιο σύνθετες αλληλεπιδράσεις μεταξύ διαφόρων ειδών φυτοπλαγκτόν. Συγκεκριμένα εξετάζει την ανάπτυξη 4 διαφορετικών ειδών (phaeocystis, flagellates, dinoflagellates, diatoms) και διαθέτει ειδικές τεχνικές για την εύρεση του είδους που θα επικρατήσει ανάλογα με τους περιοριστικούς παράγοντες και την ικανότητα προσαρμογής του κάθε είδους στις αλλαγές των περιβαλλοντικών συνθηκών.

### 1.2.3 SOBEK

Το SOBEK είναι ένα ολοκληρωμένο μονοδιάστατο μοντέλο των εταιριών Delft Hydraulics και του National Dutch Institute of Inland Water Management and Wastewater Treatment (RIZA), για τη διαχείριση του υδάτινου δυναμικού. Ανάμεσα στα πακέτα που το αποτελούν βρίσκεται το SOBEK-River, το οποίο είναι κατάλληλο για απλά ή σύνθετα δίκτυα ποταμών και εκβολές αυτών. Τα υπομοντέλα που περιλαμβάνει είναι τα εξής

- Water Flow
- Water Quality
- Sediment Transport
- Morphology
- Salt Intrusion

Το *Water Flow* βασίζεται στις πλήρεις εξισώσεις Saint Venant και μπορεί να προσομοιώσει κάθε διατομή. Επιτρέπει επίσης τον ορισμό υπο-διατομών μέσα σε μια διατομή για τον προσδιορισμό των επιφανειών κατάκλισης κατά τη διάρκεια μιας πλημμύρας. Ο χρήστης μπορεί να ορίσει έναν πάρα πολύ μεγάλο αριθμό υδραυλικών κατασκευών όπως αντλίες, υπερχειλιστές, θυροφράγματα και γέφυρες οποιοδήποτε σχήματος και να ορίσει κανόνες λειτουργίας. Τέλος μπορεί να προσομοιώσει πως επηρεάζονται οι συνθήκες ροής του ποταμού, από τον άνεμο, τις πλευρικές εισροές και τις εκροές.

Το *Water Quality* μια βιβλιοθήκη που περιέχει πάνω από 600 διεργασίες και ουσίες όπως ευτροφισμός, προσρόφηση μετάλλων, θρεπτικά, οξυγόνο, φυτοπλαγκτόν, βαρέα μέταλλα και μικροοργανικά. Ο χρήστης μπορεί να επιλέξει τις διεργασίες και τις ουσίες που τον ενδιαφέρουν και το γεγονός αυτό του δίνει μεγάλη ευελιξία και προσαρμοστικότητα στις ιδιαίτερες απαιτήσεις της κάθε εφαρμογής. Χρησιμοποιεί εξελιγμένα αριθμητικά σχήματα πεπερασμένων όγκων τα οποία περιλαμβάνουν και ισοζύγιο μάζας.

Το *River Sediment Transport* χρησιμοποιεί πέντε γνωστές μαθηματικές εξισώσεις για τη μεταφορά ιζημάτων οι οποίες είναι πλήρως προσαρμοσμένες στις απαιτήσεις του χρήστη. Το μοντέλο υπολογίζει σε ποιες περιοχές υπάρχει διάβρωση και σε ποιες απόθεση υλικού μέσω ειδικών συναρτήσεων κατανομής ιζήματος.

Το *River Morphology* προσομοιώνει τον κύκλο: ροή νερού, μεταφορά ιζήματος, αλλαγή σχήματος διατομής, ροή νερού, ενώ το *River Salt Intrusion* προσεγγίζει φαινόμενα διείσδυσης αλάτινης σφήνας σε εκβολές ποταμών ή σε ποταμούς που δέχονται έντονη επίδραση από την παλίρροια.

#### **1.2.4 Συμπεράσματα**

Η ανάλυση απαιτήσεων και ο λογικός σχεδιασμός του μοντέλου πραγματοποιήθηκε αξιολογώντας την υφιστάμενη τεχνογνωσία και εμπειρία της ερευνητικής ομάδας, καθώς επίσης τις ανάγκες της αγοράς και την απαίτηση δημιουργίας ενός ποιοτικού μοντέλου που να είναι σε θέση να περιγράφει με ικανοποιητική ακρίβεια τις διεργασίες που επιτελούνται σε ένα υδατόρευμα, χωρίς όμως την απαίτηση μεγάλου και δύσκολα αποκτήσιμου όγκου πληροφορίας. Ιδιαίτερη βαρύτητα δόθηκε στο υπολογιστικό μέρος που αναφέρεται στην επιλογή των υπό διερεύνηση ρύπων καθώς και στην περιγραφή των φυσικών, χημικών και βιολογικών διεργασιών που λαμβάνουν μέρος εντός του ποταμού.

Με βάση τα παραπάνω σχεδιάστηκε η γενική μεθοδολογία του μοντέλου διάταξης ρύπων. Το μοντέλο περιλαμβάνει ένα απλό μονοδιάστατο υδροδυναμικό μοντέλο που επιλύει τις πλήρεις εξισώσεις Saint Venant και υπολογίζει τα βάρη ροής και τις παροχές σε κάθε υπολογιστικό κόμβο. Τα χαρακτηριστικά αυτά της ροής, είναι απαραίτητα για τον υπολογισμό των φαινομένων μεταφοράς των εξεταζόμενων ρύπων με τη μάζα του νερού. Το μοντέλο προσομοιώνει 14 ουσίες και οργανισμούς μεταξύ των οποίων ευκολοδιασπάσιμες και δυσκολοδιασπάσιμες, διαλυτές και σωματιδιακές οργανικές ουσίες, αμμωνιακό, νιτρώδες και νιτρικό άζωτο, διαλυμένο οξυγόνο, φώσφορο, άλγη, ετεροτροφικούς μικροοργανισμούς και συντηρητικούς ρύπους. Οι ρύποι αυτοί κρίθηκαν ότι είναι αρκετοί για την ικανοποιητική περιγραφή της ποιοτικής κατάστασης του υδάτινου σώματος, χωρίς να αυξάνουν υπέρμετρα τον υπολογιστικό χρόνο και κυρίως χωρίς να δημιουργούν την ανάγκη απαίτησης μεγάλου όγκου δεδομένων. Οι διεργασίες του μοντέλου περιλαμβάνουν μεταξύ άλλων την ανάπτυξη και το θάνατο των ετεροτροφικών οργανισμών, την ανάπτυξη, την ενδογενή αναπνοή και το θάνατο των αλγών, τη νιτροποίηση, την απονιτροποίηση κ.





## 2 Δομή μοντέλου

---

Το μοντέλο «Ηριδανός» είναι ένα ποιοτικό μοντέλο διαίτας ρύπων σε υδατορεύματα. Για τον υπολογισμό των συγκεντρώσεων των διαφόρων ρύπων κατά μήκος του υδατορεύματος, το μοντέλο λαμβάνει υπόψη του όλα τα εξωτερικά φορτία του ποταμού (σημειακές ή πλευρικές εισροές και εκροές, σημειακά και μη σημειακά φορτία ρύπων), τις περιβαλλοντικές συνθήκες (θερμοκρασία, ηλιακή ακτινοβολία) και τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του ποταμού (υψόμετρα, κλίσεις, εγκάρσιες διατομές ποταμού).

Οι αλλαγές στην ποιότητα του νερού σε ένα ποτάμι οφείλονται κυρίως σε φαινόμενα μεταφοράς ύλης, σε βιολογικές, χημικές, βιοχημικές και φυσικές διεργασίες. Τα φαινόμενα μεταφοράς περιλαμβάνουν τη μεταγωγή και την τυρβώδη διάχυση τα οποία περιγράφονται μέσω των υδροδυναμικών μοντέλων. Οι παραπάνω διεργασίες που συμβαίνουν στην υγρή στήλη κυβερνώνται από ένα πλήθος μαθηματικών εξισώσεων οι οποίες εννοιολογικά μπορούν να παρασταθούν ως:

$$\begin{array}{ccccccc} \text{Μεταβολή στη} & & \text{Μεταβολή} & & \text{Μεταβολή λόγω} & & \text{Μεταβολή} \\ \text{συγκέντρωση με} & = & \text{λόγω} & + & \text{διάχυσης ή} & + & \text{λόγω} \\ \text{το χρόνο} & & \text{μεταγωγής} & & \text{διασποράς} & & \text{διεργασιών} \end{array}$$

και σε μαθηματική μορφή:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla E \cdot \nabla C - \nabla UC \pm r \quad (2.1)$$

όπου

C	συγκέντρωση ( $\text{gL}^{-3}$ )
t	χρόνος (T)
E	συντελεστής διασποράς ( $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ )
V	ταχύτητα ρευστού ( $\text{LT}^{-1}$ )
r	μεταβολή λόγω αντιδράσεων ή διεργασιών ( $\text{gL}^{-3}\text{T}^{-1}$ )

Για την περιγραφή των όρων της εξίσωσης το μαθηματικό μοντέλο περιλαμβάνει 3 χωριστά υπομοντέλα τα οποία εκτελούνται παράλληλα. Το πρώτο υπομοντέλο είναι ένα υδροδυναμικό μοντέλο το οποίο χρησιμοποιείται για την εύρεση του πεδίου ταχυτήτων και του βάθους ροής στο ποτάμι. Το δεύτερο υπομοντέλο είναι ένα μοντέλο μεταγωγής διασποράς το οποίο περιγράφει τη συμπεριφορά ενός συντηρητικού ρύπου, ενώ το τρίτο υπομοντέλο είναι ένα ποιοτικό μοντέλο το οποίο περιγράφει τις διάφορες διεργασίες οι οποίες συμβαίνουν στην υγρή στήλη. Στα επόμενα κεφάλαια παρουσιάζονται αναλυτικά τα τρία υπομοντέλα που συνθέτουν το μοντέλο «Ηριδανός».



### 3 Υδροδυναμικό μοντέλο

Για τη μαθηματική αντιμετώπιση του προβλήματος της κίνησης ενός ρευστού στο χώρο είναι απαραίτητο να βρεθούν οι νόμοι και οι εξισώσεις που διέπουν το φυσικό φαινόμενο.

Γενικά σε κάθε μετακίνηση μιας ποσότητας ρευστού ισχύουν οι γενικές εξισώσεις διατηρήσεως της μάζας, της ποσότητας κινήσεως και της ενέργειας. Ξεκινώντας από αυτές είναι δυνατό να φτάσουμε σε μια πιο ειδική μορφή εξισώσεων που να περιγράφουν πια ένα συγκεκριμένο πρόβλημα ροής.

Η γενική μορφή των εξισώσεων ροής σε διανυσματική μορφή για Νευτώνεια ασυμπίεστα ρευστά είναι

$$\text{εξίσωση συνέχειας} \quad \text{div} \vec{U} = 0 \quad (3.1)$$

$$\text{εξίσωση ορμής} \quad \rho \frac{d\vec{U}}{dt} = \rho \cdot \vec{f} - \text{grad}(p) + \mu \cdot \nabla^2 \vec{U} \quad (3.2)$$

όπου

$\vec{U}$	διάνυσμα της ταχύτητας
$\vec{f}$	διάνυσμα εξωτερικής δύναμης ανά μονάδα μάζας
$p$	πίεση του ρευστού
$\rho$	πυκνότητα ρευστού
$\mu$	ιξώδες ρευστού
$t$	χρόνος

Οι παραπάνω εξισώσεις είναι γνωστές με το όνομα Navier – Stokes και εκφράζουν τη διατήρηση της μάζας η πρώτη και την ισορροπία μεταξύ των δυνάμεων βαρύτητας, πίεσεως και συνεκτικότητας η δεύτερη.

Σε αναλυτική μορφή γράφονται

$$(\text{εξίσωση συνέχειας}) \quad \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (3.3)$$

$$(x - \text{ορμή}) \quad \rho \left[ \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right] = \rho \cdot f_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right] \quad (3.4)$$

$$(y - \text{ορμή}) \quad \rho \left[ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right] = \rho \cdot f_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left[ \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right] \quad (3.5)$$

$$(z - \text{ορμή}) \rho \left[ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right] = \rho \cdot f_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[ \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right] \quad (3.6)$$

όπου

u, v, w                                  συνιστώσα ταχύτητας κατά τη διεύθυνση x, y, z  
 $f_{ix}, f_y, f_z$                               συνιστώσα εξωτερικών δυνάμεων ανά μονάδα μάζας στη διεύθυνση x, y, z

### 3.1 Διαφορικές εξισώσεις ασταθούς ροής σε ανοιχτούς αγωγούς

Οι διαφορικές εξισώσεις που περιγράφουν τη μονοδιάστατη ασταθή ροή του νερού σε έναν ανοιχτό αγωγό, προκύπτουν έπειτα από απλοποίηση των εξισώσεων Navier – Stokes κάτω από ορισμένες επιπλέον παραδοχές, οι οποίες είναι οι ακόλουθες

- Το νερό είναι ασυμπίεστο και ομογενές, δηλαδή η πυκνότητα του έχει σταθερή τιμή για όλο το πεδίο ροής ανεξαρτήτως του χρόνου.
- Οι κατακόρυφες επιταχύνσεις θεωρούνται αμελητέες, συνεπώς η ροή εκλαμβάνεται ως πλήρως αναμεμειγμένη κατά την κατακόρυφη διεύθυνση.
- Οι συνιστώσες της ταχύτητας κατά την κατακόρυφη διεύθυνση παραλείπονται ως αμελητέες.
- Η πραγματική ροή στον αγωγό μπορεί να αντιπροσωπευθεί ικανοποιητικά από ροή ομοιόμορφης ταχύτητας για κάθε διατομή.
- Η πίεση στη ροή υπακούει στο νόμο της υδροστατικής πίεσεως.
- Δεν υπάρχουν έντονες ασυνέχειες ή απότομες μεταβολές στο πεδίο ροής.
- Οι εσωτερικές δυνάμεις τριβής (ιξώδες) και οι αντίστοιχες εξωτερικές (τριβές στον πυθμένα, αντίσταση του αέρα στην ελεύθερη επιφάνεια) μπορούν να συνυπολογισθούν και να αντικατασταθούν από ημιεμπειρικές εκφράσεις, όπως π.χ. η κλίση αντιστάσεων στον τύπο του Manning.

Σύμφωνα με αυτές τις παραδοχές προκύπτουν οι γνωστές εξισώσεις Saint – Venant οι οποίες αποτελούν τις μαθηματικές εκφράσεις των νόμων της διατηρήσεως της μάζας και της ορμής.

Μια σημαντική κατηγορία προβλημάτων ροής με ελεύθερη επιφάνεια αναφέρεται στην κίνηση του νερού σε τεχνητούς και φυσικούς αγωγούς. Το χαρακτηριστικό της ροής σε τέτοιου είδους προβλήματα, είναι οι μεγάλες τιμές της ταχύτητας κατά τη διεύθυνση του άξονα του αγωγού σε σχέση με τις εγκάρσιες ταχύτητες. Επομένως η ροή μπορεί να περιγραφεί πλήρως, γνωρίζοντας τη μέση ταχύτητα κατά τη διεύθυνση του άξονα του αγωγού και το βάθος του νερού. Έτσι, ενώ πρόκειται για διδιάστατο πρόβλημα, η λύση επιτυγχάνεται με μονοδιάστατη τεχνική.

Η εξίσωση συνέχειας

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = q \quad (3.7)$$

Η εξίσωση ορμής

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial \left( \frac{Q^2}{A} \right)}{\partial x} + g \cdot A \cdot \frac{\partial h}{\partial x} + g \cdot A \cdot \frac{Q \cdot |Q|}{K^2} = 0 \quad (3.8)$$

όπου

t	χρόνος (sec)
Q	παροχή (m <sup>3</sup> /sec)
A	υγρή επιφάνεια (m <sup>2</sup> )
h	βάθος ροής (m)
x	οριζόντια απόσταση (m)
g	επιτάχυνση της βαρύτητας (m/sec <sup>2</sup> )
K	παροχευτικότητα (conveyance) (m <sup>3</sup> /sec)
q	πλευρική παροχή (m <sup>3</sup> /sec/m)

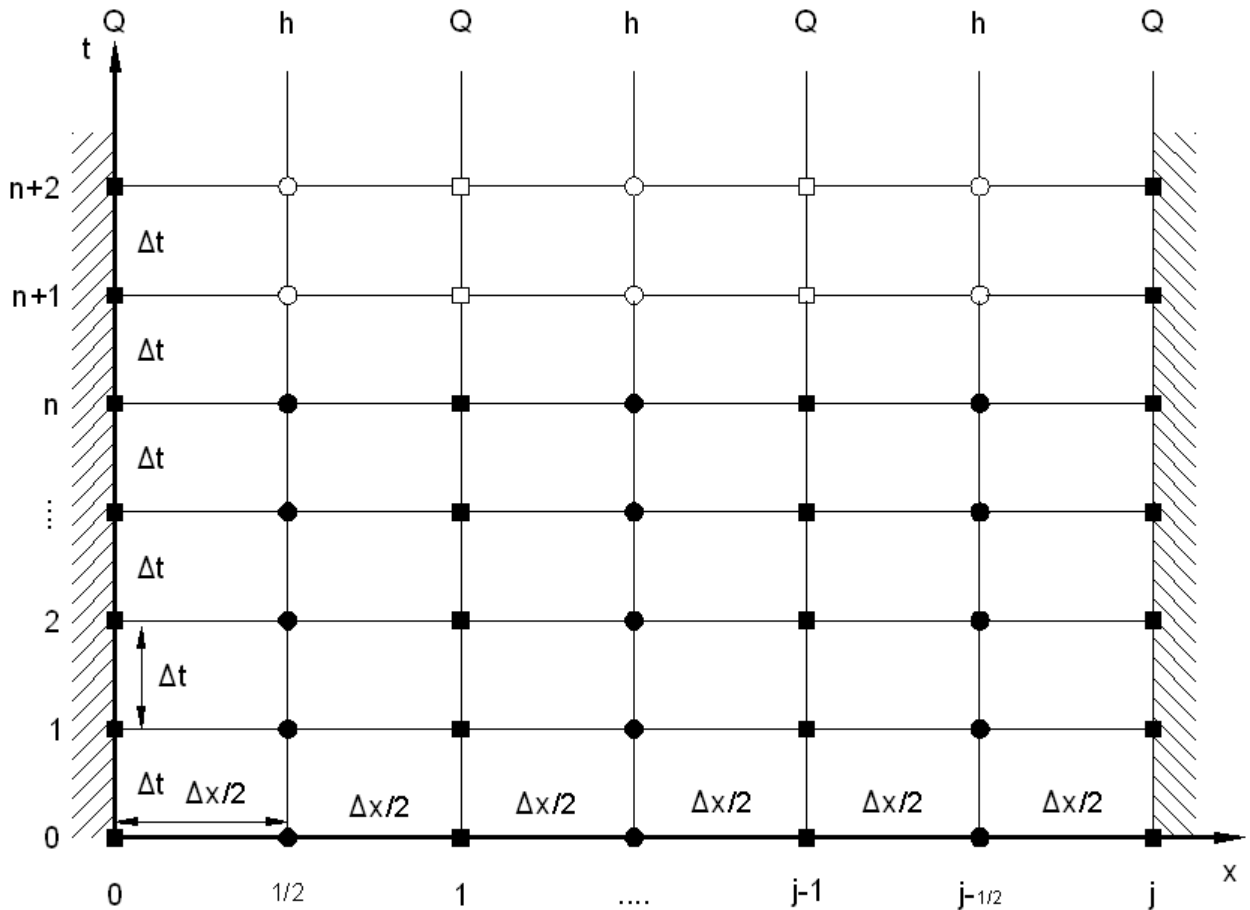
Εφόσον η επίλυση των εξισώσεων αυτών θα γίνει με αριθμητική μέθοδο τις ξαναγράφουμε σε μορφή διαφορών:

$$\frac{\Delta A}{\Delta t} + \frac{\Delta Q}{\Delta x} = q \quad (3.9)$$

και

$$\frac{\Delta Q}{\Delta t} + \frac{\Delta \left( \frac{Q^2}{A} \right)}{\Delta x} + g \cdot A \cdot \frac{\Delta h}{\Delta x} + g \cdot A \cdot \frac{Q \cdot |Q|}{K^2} = 0 \quad (3.10)$$

Το αριθμητικό σχήμα επίλυσης των εξισώσεων της συνέχειας και της ορμής βασίζεται στο σχήμα πεπερασμένων διαφορών Abbott Ionescu, αποτελούμενο από ένα εναλλασσόμενο πλέγμα Q και h σημείων (staggered grid). Το πλέγμα αυτό είναι σταθερής απόστασης Δx και χρονικού βήματος Δt, με τα σημεία τομής του πλέγματος να αποτελούν τους υπολογιστικούς κόμβους.



Σχήμα 1: Το υπολογιστικό πλέγμα

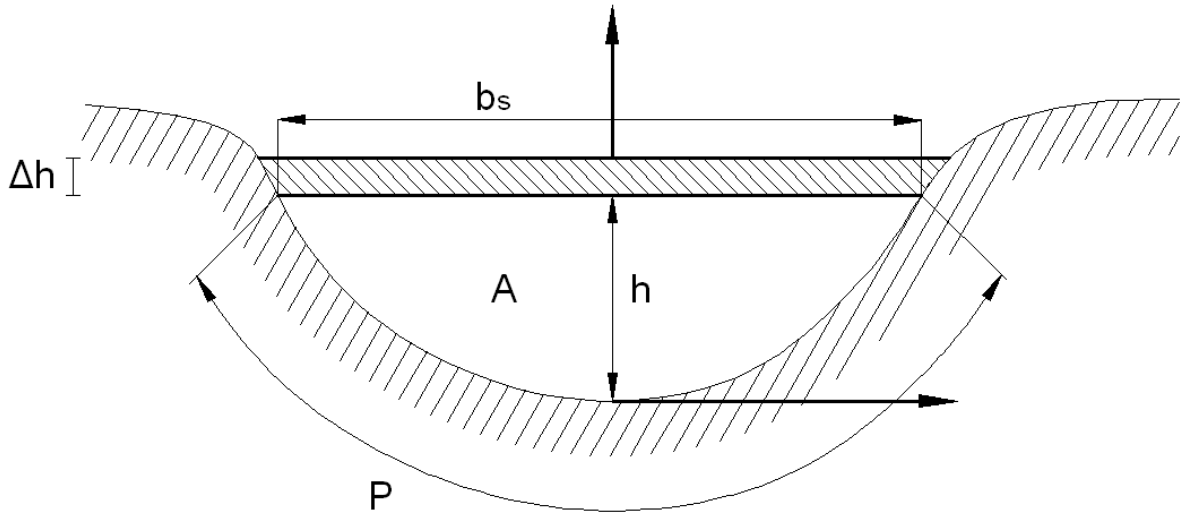
- Υπολογιστικός κόμβος με γνωστή τιμή Q
- Υπολογιστικός κόμβος με γνωστή τιμή h
- Υπολογιστικός κόμβος με άγνωστη τιμή Q
- Υπολογιστικός κόμβος με άγνωστη τιμή h

Όπως φαίνεται από τη διακριτοποίηση στο Σχήμα 1, ο αριθμός των υπολογιστικών κόμβων κατά μήκος του ποταμού είναι πάντα μονός αριθμός. Τα σημεία  $(0, 1, 2, \dots, j)$  είναι σημεία υπολογισμού παροχής Q στα οποία επιλύεται η εξίσωση συνέχειας ενώ τα σημεία  $(\frac{1}{2}, 1+\frac{1}{2}, 2+\frac{1}{2}, \dots, j-\frac{1}{2})$  γίνονται αυτόματα σημεία υπολογισμού βάθους ροής h, στα οποία επιλύεται η εξίσωση ορμής.

### 3.2 Εξίσωση συνέχειας

Αντικαθιστώντας τον όρο  $\frac{\Delta A}{\Delta t}$  με  $b_s \cdot \frac{\Delta h}{\Delta t}$  όπως εύκολα προκύπτει από το Σχήμα 2 η εξίσωση συνέχειας γράφεται

$$b_s \cdot \frac{\Delta h}{\Delta t} + \frac{\Delta Q}{\Delta x} = q \quad (3.11)$$



Σχήμα 2: Τυπική διατομή

Όπως συνηθίζεται στα σχήματα πεπερασμένων διαφορών έχουμε εισάγει ένα συντελεστή βαρύτητας  $\theta$  ως προς το χρόνο ο οποίος ανήκει στην άγνωστη γραμμή  $n+1$  του υπολογιστικού πλέγματος και αντίστοιχα ένα συντελεστή  $(1-\theta)$  ο οποίος ανήκει στη γνωστή γραμμή  $n$ . Με αυτόν τον τρόπο μπορούμε εύκολα να μεταβάλλουμε τη βαρύτητα της τιμής  $n$  και  $n+1$  σε έναν διαφορικό όρο.

$$h_{j+1/2}^{n+1} - h_{j+1/2}^n + \frac{\theta \cdot \Delta t}{(b_s)_{j+1/2}^{n+1} \cdot \Delta x} (Q_{j+1}^{n+1} - Q_j^{n+1}) + \frac{(1-\theta) \cdot \Delta t}{(b_s)_{j+1/2}^{n+1} \cdot \Delta x} (Q_{j+1}^n - Q_j^n) = 0 \quad (3.12)$$

Η εξίσωση αυτή (3.12) μπορεί να πάρει τη μορφή:

$$h_{j+1/2}^{n+1} = \alpha_{j+1/2}^{n+1} \cdot Q_j^{n+1} + \delta_{j+1/2}^{n+1} \cdot Q_{j+1}^{n+1} + \gamma_{j+1/2}^{n+1} \quad (3.13)$$

όπου

$$\alpha_{j+1/2}^{n+1} = \frac{\theta \cdot \Delta t}{\Delta x \cdot (b_s)_{j+1/2}^{n+1}}$$

$$\delta_{j+1/2}^{n+1} = -\frac{\theta \cdot \Delta t}{\Delta x \cdot (b_s)_{j+1/2}^{n+1}}$$

$$\gamma_{j+1/2}^{n+1} = h_{j+1/2}^n - \frac{(1-\theta) \cdot \Delta t}{\Delta x \cdot (b_s)_{j+1/2}^{n+1}} \cdot (Q_j^{n+1} - Q_j^n)$$

### 3.3 Εξίσωση ορμής

Αναλύοντας τους όρους της εξίσωση ορμής (3.10) έχουμε

$$\begin{aligned}
 Q_j^{n+1} - Q_j^n + \frac{\beta \cdot \Delta t \cdot Q_{j+1/2}^{n+1}}{\Delta x \cdot Q_j^{n+1/2}} \cdot \left( \theta \cdot (Q_{j+1}^{n+1} - Q_{j-1}^{n+1}) - (1-\theta) \cdot (Q_{j+1}^n - Q_{j-1}^n) \right) + \\
 g \cdot A_j^{n+1/2} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot \left[ \theta \cdot (h_{j+1/2}^{n+1} - h_{j-1/2}^{n+1}) + (1-\theta) \cdot (h_{j+1/2}^n - h_{j-1/2}^n) \right] + \\
 \frac{g \cdot A_j^{n+1/2} \cdot \Delta t}{(K_j^{n+1/2})^2} \cdot |Q_j^n| \cdot Q_j^{n+1} = 0
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

Ο συντελεστής  $\beta$  που εμφανίζεται στην εξίσωση (3.14) είναι ο συντελεστής κατακόρυφης κατανομής της ταχύτητας στη διατομή.

Ανακατατάσσοντας τους όρους της εξίσωσης μπορούμε να τη φέρουμε στη μορφή

$$\chi_j^{n+1} \cdot Q_{j-1}^{n+1} + \varepsilon_j^{n+1} \cdot h_{j-1/2}^{n+1} + \phi_j^{n+1} \cdot Q_j^{n+1} + \eta_j^{n+1} \cdot h_{j+1/2}^{n+1} + \lambda_j^{n+1} \cdot Q_{j+1}^{n+1} = \mu_j^{n+1} \tag{3.15}$$

Χρησιμοποιώντας την εξίσωση (3.13) όμως, μπορούμε να απαλείψουμε τους όρους  $h_{j-1/2}^{n+1}$  και  $h_{j+1/2}^{n+1}$  και να γράψουμε

$$\alpha_j^{n+1} \cdot Q_{j-1}^{n+1} + b_j^{n+1} \cdot Q_j^{n+1} + c_j^{n+1} \cdot Q_{j+1}^{n+1} = d_j^{n+1} \tag{3.16}$$

όπου

$$\alpha_j^{n+1} = -\frac{\beta \cdot \theta \cdot \Delta t}{\Delta x} \cdot \frac{Q_j^{n+1/2}}{A_j^{n+1/2}} - \frac{\theta \cdot \Delta t}{\Delta x} \cdot g \cdot A_j^{n+1/2} \cdot \alpha_{j-1/2}^{n+1}$$

$$b_j^{n+1} = 1 + \Delta t \cdot g \cdot \frac{A_j^{n+1/2}}{(K_j^{n+1/2})^2} |Q_j^n| + \frac{\Delta t \cdot \theta}{\Delta x} \cdot g \cdot A_j^{n+1/2} \cdot (\alpha_{j+1/2}^{n+1} - \delta_{j-1/2}^{n+1})$$

$$c_j^{n+1} = \frac{\beta \cdot \theta \cdot \Delta t}{\Delta x} \cdot \frac{Q_j^{n+1/2}}{A_j^{n+1/2}} + \frac{\theta \cdot \Delta t}{\Delta x} \cdot g \cdot A_j^{n+1/2} \cdot \delta_{j+1/2}^{n+1}$$

$$\begin{aligned}
 d_j^{n+1} = & Q_j^n - g \cdot A_j^{n+1/2} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot \left[ \theta \cdot (\gamma_{j+1/2}^{n+1} - \gamma_{j-1/2}^{n+1}) + (1-\theta) \cdot (h_{j+1/2}^n - h_{j-1/2}^n) \right] \\
 & - \frac{\beta \cdot \Delta t}{\Delta x} \cdot \frac{Q_j^{n+1/2}}{A_j^{n+1/2}} \cdot (1-\theta) \cdot (Q_{j+1}^n - Q_{j-1}^n)
 \end{aligned}$$



### 3.4 Μέθοδος επίλυσης

Γράφοντας τις εξισώσεις (3.13) και (3.16) σε κάθε κόμβο του υπολογιστικού πλέγματος έχουμε ένα σύστημα  $2 \cdot j - 1$  εξισώσεων. Οι άγνωστοι στο σύστημα των εξισώσεων είναι τα βάθη ροής

$$h_i^{n+1}, \quad i = 1/2, 1+1/2, 2+1/2, j-1/2 \quad \text{και οι παροχές } Q_i^{n+1}, \quad i = 1, 2, 3, j-1.$$

Παρατηρούμε ότι το σύστημα των εξισώσεων της ορμής έχει τη μορφή

$$\begin{array}{l} \text{οριακη συνθηκη} \\ \text{εξ. ορμής} \\ \text{εξ. ορμής} \\ \text{εξ. ορμής} \\ \text{εξ. ορμής} \\ \text{εξ. ορμής} \\ \vdots \\ \text{εξ. ορμής} \\ \text{εξ. ορμής} \\ \text{οριακη συνθηκη} \end{array} \begin{bmatrix} * & * & & & & & & & & \\ * & * & * & & & & & & & \\ & * & * & * & & & & & & \\ & & * & * & * & & & & & \\ & & & * & * & * & & & & \\ & & & & * & * & * & & & \\ & & & & & * & * & * & & \\ & & & & & & * & * & * & \\ & & & & & & & * & * & * \\ & & & & & & & & * & * \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_0^{n+1} \\ Q_1^{n+1} \\ Q_2^{n+1} \\ Q_3^{n+1} \\ Q_4^{n+1} \\ Q_5^{n+1} \\ \vdots \\ Q_{j-2}^{n+1} \\ Q_{j-1}^{n+1} \\ Q_j^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ * \\ * \\ * \\ * \\ * \\ * \\ * \\ * \\ * \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

Το σύστημα των εξισώσεων (3.17) λύνεται με τη μέθοδο Thomas ή double sweep algorithm. Η μέθοδος αυτή βασίζεται σε διαδοχική αντικατάσταση των όρων της μιας εξίσωσης στην επόμενη. Λύνοντας ως προς  $Q_1^{n+1}$  την πρώτη εξίσωση και αντικαθιστώντας στη δεύτερη έχουμε μια εξίσωση που έχει ως άγνωστους μόνο τις παροχές  $Q_1^{n+1}$  και  $Q_2^{n+1}$ . Λύνοντας αυτή την εξίσωση ως προς  $Q_1^{n+1}$  και αντικαθιστώντας στην επόμενη έχουμε μια εξίσωση με άγνωστους τις παροχές  $Q_2^{n+1}$  και  $Q_3^{n+1}$ . Επαναλαμβάνοντας τη διαδικασία αυτή μέχρι το τέλος καταλήγουμε στην τελευταία εξίσωση του συστήματος η οποία περιέχει έναν μόνο άγνωστο  $Q_j^{n+1}$  και την οποία μπορούμε να λύσουμε. Κάνοντας την ίδια διαδικασία προς τα πίσω αυτή τη φορά μπορούμε να βρούμε τις τιμές όλων των παροχών και στη συνέχεια από την εξίσωση (3.13) μπορούμε να υπολογίσουμε και τα βάθη ροής.

Παρατηρώντας πιο προσεκτικά τους συντελεστές των εξισώσεων της ορμής διαπιστώνουμε ότι περιέχουν  $n+1$  τιμές των παροχών και των βαθών ροής, όπως για παράδειγμα οι συντελεστές  $\alpha_j^{n+1}, b_j^{n+1}, c_j^{n+1}, d_j^{n+1}$ . Το γεγονός αυτό μας οδηγεί σε μια επαναληπτική διαδικασία όπου κατά το πρώτο βήμα πρέπει να αντικαταστήσουμε τις  $n+1$  τιμές με τις αντίστοιχες του χρονικού βήματος  $n$ . Επιλύοντας το σύστημα για πρώτη φορά αποκτούμε μια πρώτη προσέγγιση των  $n+1$  τιμών, με τις οποίες μπορούμε να βελτιώσουμε τις τιμές των συντελεστών  $\alpha_j^{n+1}, b_j^{n+1}, c_j^{n+1}, d_j^{n+1}$  στους οποίους αυτές συμμετέχουν. Η παραπάνω διαδικασία συνεχίζεται μέχρι να εξαντληθεί ο αριθμός των μέγιστων επαναλήψεων που έχουμε ορίσει ή να επιτευχθεί ένας επιθυμητός βαθμός ακρίβειας μέσω ενός κριτηρίου σύγκλισης.

Μια δεύτερη παρατήρηση που έχει να κάνει με το αριθμητικό σχήμα είναι ότι μερικοί συντελεστές περιέχουν το βάθος ροής ή τιμές εξαρτώμενες από αυτό σε σημεία του πλέγματος που ανήκουν στις

γραμμές παροχής Q. Αυτό σημαίνει ότι πρέπει να υπολογιστούν τιμές του βάθους ροής στα Q-σημεία και ο ευκολότερος τρόπος για να γίνει αυτό είναι μέσω παρεμβολής (γραμμικής ή παραβολικής) που θα πραγματοποιείται σε κάθε ενδιάμεσο ή τελικό βήμα της επαναληπτικής διαδικασίας.

Μπορούμε να συνοψίσουμε την παραπάνω διαδικασία στα εξής διακριτά βήματα.

1. Όταν ο υπολογισμός της γραμμής n έχει ολοκληρωθεί υπολογίζονται μέσω παρεμβολής οι τιμές του βάθους ροής h στα σημεία παροχής Q.
2. Το σύστημα των εξισώσεων επιλύεται για πρώτη φορά χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο Thomas. Όσον αφορά τις τιμές μεταβλητών του χρονικού βήματος n+1 που εμφανίζονται στους συντελεστές των εξισώσεων, χρησιμοποιούνται στην πρώτη μόνο επανάληψη οι τιμές του χρονικού βήματος n+1.
3. Η διαδικασία της παρεμβολής (1) εκτελείται για το πρώτο σύνολο τιμών Q και h που αποκτήθηκε.
4. Χρησιμοποιώντας το πρώτο σύνολο τιμών το σύστημα των εξισώσεων επιλύεται για δεύτερη (και τελευταία) φορά με τον αλγόριθμο Thomas.

Επαναλαμβάνοντας τα βήματα (3) και (4) η επαναληπτική διαδικασία μπορεί να εκτελεστεί όσες φορές χρειαστεί. Παρόλα αυτά η επανάληψη της διαδικασίας 2 φορές είναι αρκετή για την απόκτηση αποτελεσμάτων ικανοποιητικής ακρίβειας. Εξάλλου όπως έχει διαπιστωθεί στην πράξη, η επανάληψη της διαδικασίας για τρίτη ή τέταρτη φορά προσφέρει ελάχιστο κέρδος σε ακρίβεια σε σχέση με την αύξηση του υπολογιστικού φόρτου.

Σε κάθε επανάληψη το πρόγραμμα εκτελεί έναν έλεγχο σύγκλισης. Εάν η μεταβολή στα αποτελέσματα δυο διαδοχικών επαναλήψεων είναι μικρότερη από την επιθυμητή ανοχή (tolerance) που έχει τεθεί, σε όλους τους υπολογιστικούς κόμβους, τότε η επαναληπτική διαδικασία σταματάει. Παρόλα αυτά υπάρχει και ένας μέγιστος αριθμός επαναλήψεων (maximum iterations) που μπορεί να εκτελεστεί η παραπάνω διαδικασία, με σκοπό την αποφυγή κολλήματος του προγράμματος σε περιπτώσεις που δεν μπορεί να επιτευχθεί σύγκλιση ή αυτή πραγματοποιείται με πολύ αργό ρυθμό.

### 3.5 Οριακές συνθήκες

Το αριθμητικό σχήμα χρησιμοποιεί μια οριακή συνθήκη για κάθε όριο (μια ανάντη και μια κατάντη) και για αυτό το λόγο είναι σταθερό για όλες τις συνθήκες ροής (υποκρίσιμες, υπερκρίσιμες). Η ανάντη οριακή συνθήκη είναι συνήθως η τιμή της παροχής η οποία θεωρείται γνωστή. Πρέπει να σημειωθεί ότι η παροχή ανάντη δεν χρειάζεται να είναι σταθερή στο χρόνο, απλώς πρέπει να είναι γνωστή σε κάθε χρονική στιγμή.

Η οριακή συνθήκη κατάντη είναι συνήθως μια σχέση μεταξύ της παροχής και του βάθους ροής ( $y = a \cdot h^b$ ) η οποία προκύπτει για παράδειγμα από τον τύπο του Manning.

### 3.6 Ευστάθεια

Το αριθμητικό σχήμα που περιγράφηκε παραπάνω εμφανίζει σταθερότητα στα αποτελέσματα χωρίς την ύπαρξη αριθμητικής διάχυσης. Η σταθερότητα αναφέρεται στην ιδιότητα του αριθμητικού σχήματος να μην μεταφέρει μια μικρή αριθμητική διαταραχή στα αποτελέσματα που παρατηρείται, έστω στο χρονικό βήμα n, να μην μεγεθύνεται στα επόμενα χρονικά βήματα. Η αριθμητική διάχυση

αναφέρεται σε ένα ανεπιθύμητο χαρακτηριστικό των σχημάτων πεπερασμένων διαφορών κατά το οποίο παρουσιάζεται υπερβολικά γρήγορη απόσβεση πχ ενός μεμονωμένου κύματος, από ότι παρατηρείται στην πραγματικότητα.

Όπως έχει αναφερθεί το αριθμητικό σχήμα, λόγω της δομής του, είναι σταθερό για όλους τους συνδυασμούς του αριθμού Courant  $\left( Cr = \frac{v \cdot dt}{dx} \right)$  και του αριθμού Froude  $\left( Fr = \frac{v}{\sqrt{g \cdot h}} \right)$ , με την προϋπόθεση ότι ο συντελεστής  $\theta$  είναι μεγαλύτερος από 0.5.



## 4 Μοντέλο μεταγωγής – διασποράς

Το μοντέλο μεταγωγής διασποράς υπολογίζει τη συγκέντρωση μάζας σε κάθε υπολογιστικό κελί μέσω της επίλυσης της εξίσωσης μεταγωγής – διασποράς η οποία στην περίπτωση μονοδιάστατου αποδέκτη γράφεται

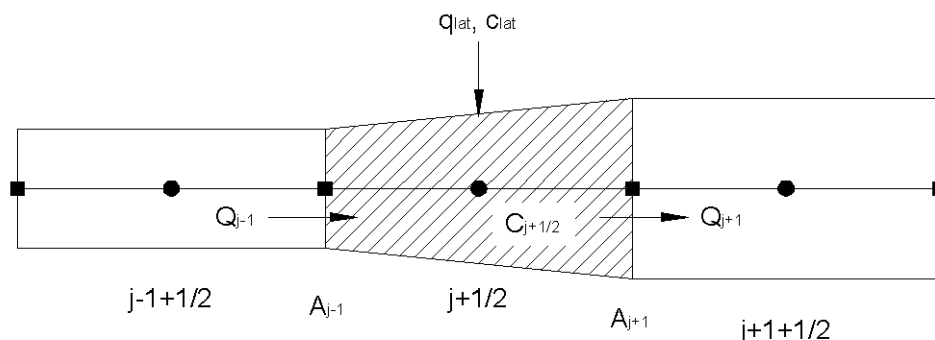
$$\frac{\partial(A \cdot C)}{\partial t} + \frac{\partial(Q \cdot C)}{\partial x} - \frac{\partial(A \cdot D \cdot \frac{\partial C}{\partial x})}{\partial x} = c_{lat} \cdot q_{lat} \quad (4.1)$$

όπου

A	εμβαδόν διατομής (m <sup>2</sup> )
C	συγκέντρωση ουσίας (g/m <sup>3</sup> )
t	χρόνος (sec)
Q	παροχή (m <sup>3</sup> /sec)
D	συντελεστής διασποράς κατά x (m <sup>2</sup> /sec)
x	κατά μήκος απόσταση (m)
q <sub>lat</sub>	πλευρική παροχή (m <sup>3</sup> /sec/m)
c <sub>lat</sub>	συγκέντρωση πλευρικής παροχής (g/m <sup>3</sup> )

### 4.1 Μέθοδος επίλυσης

Η εξίσωση μεταγωγής – διασποράς (4.1) επιλύεται με ένα πεπλεγμένο σχήμα πεπερασμένων διαφορών ώστε να ελαχιστοποιηθεί η αριθμητική διάχυση. Το αριθμητικό σχήμα διαμορφώνεται υπολογίζοντας τη ροή μάζας που εισέρχεται και εξέρχεται σε κάθε υπολογιστικό κόμβο.



Σχήμα 3: Ο υπολογιστικός όγκος για την επίλυση της εξίσωσης μεταγωγής – διασποράς

Όπως φαίνεται στο Σχήμα 3 εκατέρωθεν των h σημείων σχηματίζεται ένας όγκος ελέγχου. Τα όρια αυτού του όγκου είναι ο πυθμένας του ποταμού, η υγρή επιφάνεια και οι δυο διατομές που βρίσκονται στο αριστερό και δεξί Q σημείο. Η εξίσωση συνέχειας για αυτόν τον όγκο μπορεί να γραφτεί ως:

$$\frac{V_{j+1/2}^{n+1/2} \cdot C_{j+1/2}^{n+1}}{\Delta t} - \frac{V_{j+1/2}^n \cdot C_{j+1/2}^n}{\Delta t} = T_{j-1}^{n+1/2} - T_{j+1}^{n+1/2} + Q_{\text{lat}}^{n+1/2} \cdot c_{\text{lat}}^{n+1/2} \quad (4.2)$$

όπου

$V$  όγκος του κελιού ( $\text{m}^3$ )  
 $T_{j-1}, T_{j+1}$  μεταφορά μάζας μέσω της αριστερής και δεξιάς διατομής

Ο όρος μεταφοράς μάζας  $T$  ορίζεται από την εξίσωση:

$$T_{j+1}^{n+1/2} = Q_{j+1}^{n+1/2} \cdot C_j^* - A_{j+1}^{n+1/2} \cdot D \cdot \frac{C_{j+1+1/2}^{n+1/2} - C_{j+1/2}^{n+1/2}}{\Delta x} \quad (4.3)$$

όπου

$Q_{j+1}$  η παροχή στο δεξί όριο του κελιού ( $\text{m}^3/\text{sec}$ )

Ο όρος  $C_j^*$  ορίζεται από την εξίσωση:

$$C_j^* = \frac{1}{4} \left( C_{j+1+1/2}^{n+1} + C_{j+1/2}^{n+1} + C_{j+1+1/2}^n + C_{j+1/2}^n \right) - \min \left( \frac{1}{6} + \frac{\sigma^2}{2}, \frac{1}{4\sigma} \right) \cdot \left( C_{j+1+1/2}^n - 2 \cdot C_{j+1/2}^n + C_{j-1/2}^n \right) \quad (4.4)$$

όπου  $\sigma$  ο αριθμός Courant  $\left( \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} \right)$

Γράφοντας τις εξισώσεις (4.2) και (4.3) για όλα τα  $j$  σημεία δημιουργείται ένα σύστημα από  $j$  εξισώσεις της μορφής:

$$\kappa_j \cdot C_{j-1+1/2}^{n+1} + \lambda_j \cdot C_{j+1/2}^{n+1} + \mu_j \cdot C_{j+1+1/2}^{n+1} = \nu_j \quad (4.5)$$

Όπως παρατηρούμε από την εξίσωση (4.3) εμφανίζεται ο όρος  $C^{n+1/2}$  που όπως υποδηλώνει και ο εκθέτης ισούται με  $C^{n+1/2} = \frac{C^{n+1} + C^n}{2}$ . Αυτό μας οδηγεί σε μια επαναληπτική διαδικασία ανάλογη με αυτή του υδροδυναμικού μοντέλου, κατά την οποία σε κάθε επίλυση έχουμε μια καλύτερη προσέγγιση του όρου  $C^{n+1/2}$ . Κατά αντιστοιχία το σύστημα των εξισώσεων έχει μορφή τριδιαγωνίου πίνακα και μπορεί να επιλυθεί με τον αλγόριθμο Thomas (double sweep).

## 4.2 Οριακές συνθήκες

Η εξίσωση μεταγωγής – διασποράς γράφεται και επιλύεται χωριστά για κάθε ρύπο που εξετάζεται στο μοντέλο. Για να είναι δυνατή η επίλυση του συστήματος είναι αναγκαία η γνώση των συγκεντρώσεων του κάθε ρύπου στο αριστερό όριο του πρώτου υπολογιστικού κελιού. Παράλληλα λοιπόν με την

ανάντη οριακή συνθήκη του υδροδυναμικού μοντέλου, η οποία απαιτεί την γνώση εκ των προτέρων της παροχής  $Q_0$ , ο χρήστης καλείται να εισάγει τις συγκεντρώσεις όλων των ρύπων της παροχής αυτής.

Για το κατάντη όριο επιλέγεται μια συνθήκη ανοιχτού ορίου (open boundary outflow) κατά την οποία θεωρείται ότι:

$$\left( \frac{d^2C}{dx^2} \right)_{\text{κατάντη}} = 0 \quad (4.6)$$

### 4.3 Ευστάθεια

Το πεπλεγμένο αριθμητικό σχήμα κεντρικών διαφορών που χρησιμοποιείται για την επίλυση της εξίσωσης μεταγωγής – διασποράς είναι σταθερό ακόμα και για μεγάλους αριθμούς Peclet για παράδειγμα:

$$Pe = \frac{u \cdot \Delta x}{D} > 2 \quad (4.7)$$

όπου

$D$  συντελεστής επιμήκους διασποράς ( $m^2/sec$ )

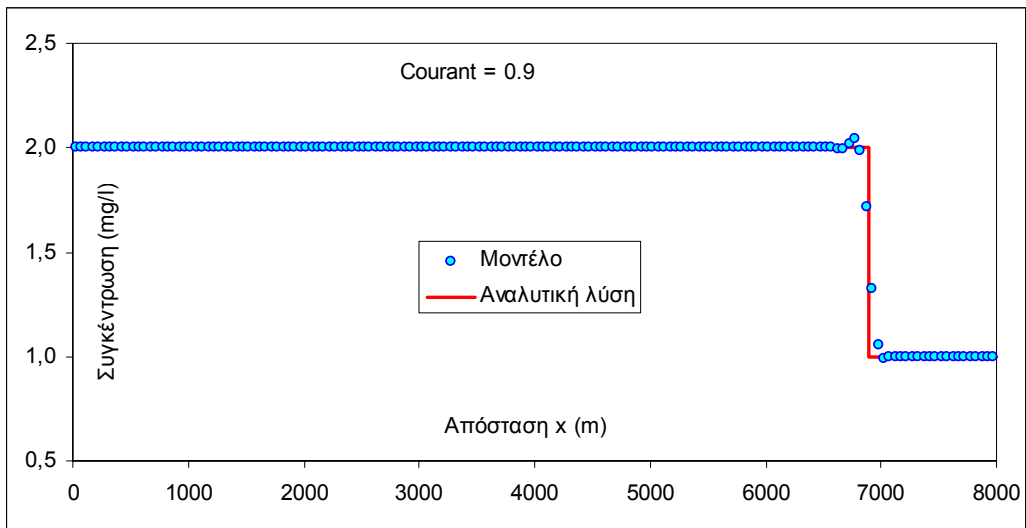
Το χρονικό και χωρικό βήμα πρέπει να επιλεγούν έτσι ώστε ο αριθμός Courant να είναι μικρότερος από τη μονάδα.

$$Cr = \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} < 1 \quad (4.8)$$

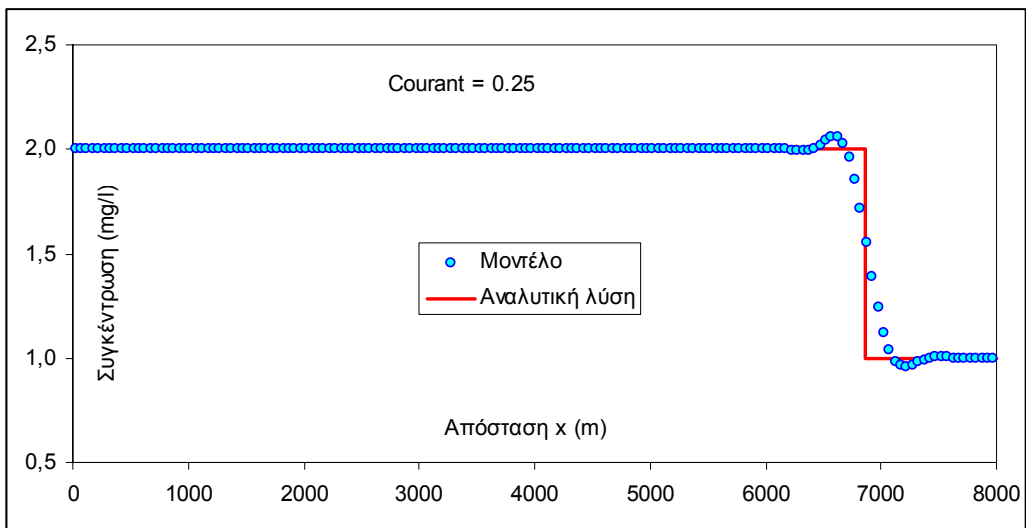
Για να διαπιστωθεί η επίδραση της αριθμητικής διάχυσης έγινε η εξής εφαρμογή. Σε ένα ποτάμι μήκους 8000m με αρχική συγκέντρωση ενός συντηρητικού ρύπου  $X$  1 mg/l, αρχίζει να εισέρχεται παροχή με συγκέντρωση του ρύπου  $X$  2mg/l. Στο Σχήμα 4 φαίνονται τα αποτελέσματα του μοντέλου

για αριθμό Courant,  $Cr = \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} = 0.9$  και  $\Delta x=50m$ , καθώς και η αναλυτική λύση. Ακόμα και στην

δυσμενέστερη, για την εμφάνιση αριθμητικής διάχυσης, περίπτωση όπου ο αριθμός Courant είναι ίσος με  $Cr = 0.25$  η αριθμητική διάχυση παραμένει σε φυσιολογικά επίπεδα και δεν φαίνεται να αποτελεί σημαντικό πρόβλημα (Σχήμα 5).



Σχήμα 4: Σύγκριση μοντέλου – αναλυτικής λύσης στην περίπτωση απότομου ορίου ( $Cr=0.9$ )



Σχήμα 5: Σύγκριση μοντέλου – αναλυτικής λύσης στην περίπτωση απότομου ορίου ( $Cr=0.25$ )



## 5 Ποιοτικό Μοντέλο

---

### 5.1 Δομή ποιοτικού υπομοντέλου

Το ποιοτικό μοντέλο υπολογίζει σε κάθε χρονική στιγμή τη μεταβολή της συγκέντρωσης όλων των εξεταζόμενων ρύπων λόγω των χημικών και βιολογικών διεργασιών, τον όρο  $r$  δηλαδή της εξίσωσης

$$(2.1) \left[ \frac{\partial C}{\partial t} = \nabla E \cdot \nabla C - \nabla UC \pm r \right].$$
 Οι εξισώσεις που έχουν χρησιμοποιηθεί για τη μαθηματική

περιγραφή των διεργασιών βασίζονται στο River Water Quality Model 1 της IWA. Οι εξισώσεις περιγράφονται με τη μορφή πίνακα (Petersen matrix) με όρους στοιχειομετρίας και κινητικών εξισώσεων και είναι παρόμοια με τη μορφή των μοντέλων ενεργού ιλύος. Σε αντίθεση με άλλα μοντέλα που η περιγραφή των οργανικών ουσιών βασίζεται στο COD και στα ποσοστά άνθρακα, αζώτου και φωσφόρου που αυτό περιέχει, η περιγραφή της σύνθεσης της οργανικής ουσίας και της στοιχειομετρίας των διεργασιών θα βασιστεί στις μάζες των στοιχείων που συνθέτουν κάθε οργανική χημική ένωση. Για λόγους συμβατότητας πάντως, θα δοθούν οι εξισώσεις μετατροπής των εξισώσεων και των παραμέτρων από τη μια μέθοδο στην άλλη και αντιστρόφως.

### 5.2 Παραδοχές

Οι παραδοχές υπό τις οποίες αναπτύχθηκαν οι κινητικές εξισώσεις των διεργασιών είναι οι εξής:

1. Τα χημικά στοιχεία που συνθέτουν όλους τους οργανισμούς και τις χημικές ενώσεις που εξετάζονται στο μοντέλο, θεωρείται ότι είναι ο άνθρακας (C), το υδρογόνο (H), το οξυγόνο (O), το άζωτο και ο φώσφορος. Όλα τα υπόλοιπα στοιχεία αντιπροσωπεύονται από το πρόσθετο στοιχείο X.
2. Η σύνθεση των ενώσεων και των οργανισμών που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο θεωρείται ότι παραμένει σταθερή στο χρόνο κατά τη διάρκεια μιας εφαρμογής (μπορεί όμως να αλλάξει σε κάποια άλλη εφαρμογή).
3. Δεν υπάρχει δυνατότητα προσαρμογής των οργανισμών και οι όποιες αλλαγές στα είδη των οργανισμών θεωρούνται αμελητέες. Αυτό σημαίνει ότι η χρονική μεταβολή της ταχύτητας των αντιδράσεων, πραγματοποιείται μόνο μέσω της εξάρτησης της από τις συγκεντρώσεις άλλων ουσιών του μοντέλου ή από περιβαλλοντικές συνθήκες όπως η θερμοκρασία και η ακτινοβολία.

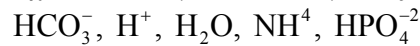
Η σύνθεση κάθε οργανικής ουσίας ή οργανισμού μπορεί να περιγραφεί μονοσήμαντα από τα κλάσματα μάζας των στοιχείων C, H, O, N, P και του 'στοιχείου' X που περιγράφει όλα τα άλλα στοιχεία

$$\alpha_C, \alpha_H, \alpha_O, \alpha_N, \alpha_P, \alpha_X$$

Όπως γίνεται εύκολα αντιληπτό αυτά τα κλάσματα μάζας για κάθε ουσία θα πρέπει να ικανοποιούν τον περιορισμό

$$\alpha_C + \alpha_H + \alpha_O + \alpha_N + \alpha_P + \alpha_X = 1 \quad (5.1)$$

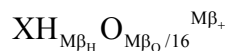
Ο περιορισμός για σταθερή σύνθεση όλων των ουσιών και των οργανισμών σε συγκεκριμένα στοιχεία μας επιτρέπει να χρησιμοποιήσουμε αυτά τα κλάσματα μάζας ως παραμέτρους του μοντέλου. Η συσχέτιση των εξισώσεων των διεργασιών μεταξύ της μεθόδου που κάνει χρήση των κλασμάτων μάζας των στοιχείων και της μεθόδου που βασίζεται στην έννοια του COD, θα γίνει μέσω της διαδικασίας της ανοργανοποίησης (mineralization). Για το σκοπό αυτό θα πρέπει να καθοριστεί το προϊόν ανοργανοποίησης κάθε στοιχείου. Αυτό γίνεται επιλέγοντας τις ενώσεις



ως τα προϊόντα της παραπάνω διαδικασίας που αντιστοιχούν στα στοιχεία C, H, O, N και P αντίστοιχα. Το προϊόν ανοργανοποίησης του στοιχείου περιγράφεται από τις ακόλουθες τρεις παραμέτρους

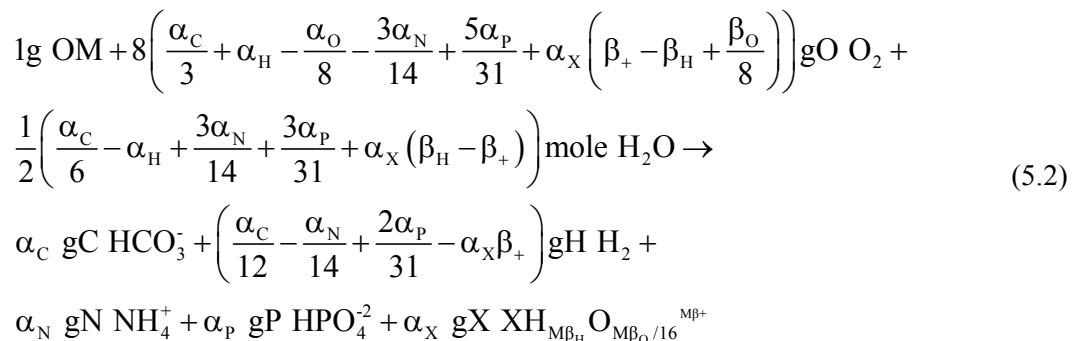
$$\beta_+, \beta_H, \beta_O$$

Αυτές οι τρεις παράμετροι χαρακτηρίζουν το φορτίο, τη μάζα του υδρογόνου και τη μάζα του οξυγόνου ανά μονάδα μάζας του στοιχείου X. Επομένως ο χημικός τύπος αυτού του στοιχείου μπορεί να γραφτεί ως:



Ο δείκτης  $\text{M}\beta_H$  αντιπροσωπεύει τον αριθμό ατόμων υδρογόνου, ο δείκτης  $\text{M}\beta_O/16$  τα άτομα οξυγόνου και τέλος ο εκθέτης  $\text{M}\beta_+$  το ηλεκτρικό φορτίο.

Έχοντας υπόψη τα παραπάνω και ότι 1 gr OM (ξηρή μάζα για σωματιδιακές ενώσεις) αποτελείται από  $\alpha_C$  gr C,  $\alpha_H$  gr H,  $\alpha_O$  gr O,  $\alpha_N$  gr N,  $\alpha_P$  gr P και  $\alpha_X$  gr X μπορούμε να γράψουμε για τη διαδικασία της ανοργανοποίησης:



Ο συντελεστής μετατροπής  $\gamma$  (gCOD/gOM) μπορεί εύκολα να εξαχθεί από την παραπάνω σχέση ως ο συντελεστής κατανάλωσης οξυγόνου:

$$\gamma = 8 \left( \frac{\alpha_C}{3} + \alpha_H - \frac{\alpha_O}{8} - \frac{3\alpha_N}{14} + \frac{5\alpha_P}{31} + \alpha_X \left( \beta_+ - \beta_H + \frac{\beta_O}{8} \right) \right) \quad (5.3)$$

Αυτή η εξίσωση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εξαγωγή των παραμέτρων  $i_N$ ,  $i_P$  και  $i_C$  που αντιπροσωπεύουν τα ποσοστά αζώτου, φωσφόρου και άνθρακα ανά μονάδα COD.

$$i_N = \frac{\alpha_N}{8 \left( \frac{\alpha_C}{3} + \alpha_H - \frac{\alpha_O}{8} - \frac{3\alpha_N}{14} + \frac{5\alpha_P}{31} + \alpha_X \left( \beta_+ - \beta_H + \frac{\beta_O}{8} \right) \right)} = \frac{\alpha_N}{\gamma} \frac{\text{gN}}{\text{gCOD}} \quad (5.4)$$

$$i_p = \frac{\alpha_p}{8 \left( \frac{\alpha_C}{3} + \alpha_H - \frac{\alpha_O}{8} - \frac{3\alpha_N}{14} + \frac{5\alpha_P}{31} + \alpha_X \left( \beta_+ - \beta_H + \frac{\beta_O}{8} \right) \right)} = \frac{\alpha_p}{\gamma} \frac{gP}{gCOD} \quad (5.5)$$

$$i_C = \frac{\alpha_C}{8 \left( \frac{\alpha_C}{3} + \alpha_H - \frac{\alpha_O}{8} - \frac{3\alpha_N}{14} + \frac{5\alpha_P}{31} + \alpha_X \left( \beta_+ - \beta_H + \frac{\beta_O}{8} \right) \right)} = \frac{\alpha_C}{\gamma} \frac{gC}{gCOD} \quad (5.6)$$

Η παρουσία του στοιχείου X στην οργανική ουσία οδηγεί σε ένα ισοδύναμο COD,  $\gamma_X$  (gCOD/gX):

$$\gamma_X = 8(\beta_+ - \beta_H) + \beta_O \quad (5.7)$$

Ο Πίνακας 1 παρουσιάζει τις τιμές των παραμέτρων  $\beta$  και  $\gamma_X$  για τα στοιχεία που θεωρούνται στο μοντέλο.

Πίνακας 1: Παραδείγματα στοιχείων που περιέχονται στο κλάσμα μάζας 'α'

Κλάσμα μάζας	Στοιχείο	Ένωση αναφοράς	Σύνθεση της ένωση αναφοράς			Ισοδύναμο COD	
			$\beta_+$ ηλ. φορ gX	$\beta_H$ gH gX	$\beta_O$ gO gX	$\gamma_X$ gCOD gX	$\gamma_X$ gCOD moleX
$\alpha_C$	C	$HCO_3^-$	-1/12	1/12	48/12	+32/12	+32
$\alpha_H$	H	$H^+$	1	1	0	0	0
$\alpha_O$	O	$H_2O$	0	2/16	16/16	0	0
$\alpha_N$	N	$NH_4^+$	1/14	4/14	0	-24/14	-24
$\alpha_P$	P	$HPO_4^{2-}$	-2/31	1/31	64/31	+40/31	+40

### 5.3 Ουσίες που εξετάζονται στο μοντέλο

Οι ουσίες οι οποίες λαμβάνονται υπόψη από το μοντέλο και οι οποίες αποτελούν τις μεταβλητές του είναι οι εξής:

- $S_S$ : Διαλυμένες οργανικές ουσίες που θεωρείται ότι είναι έτοιμες προς γρήγορη αποδόμηση από τους ετεροτροφικούς οργανισμούς. Η σύνθεση τους χαρακτηρίζεται από  $\alpha_C, SS, \alpha_H, SS, \alpha_O, SS, \alpha_N, SS, \alpha_P, SS, \alpha_X, SS$ .
- $S_I$ : Αδρανείς διαλυμένες οργανικές ενώσεις. Αυτές οι ενώσεις θεωρείται ότι δεν είναι βιοδιασπασίμες μέσα στο χρονικό πλαίσιο που εξετάζεται. Η σύνθεση τους χαρακτηρίζεται από  $\alpha_C, SI, \alpha_H, SI, \alpha_O, SI, \alpha_N, SI, \alpha_P, SI, \alpha_X, SI$ .
- $S_{NH_4}$ : Αμμωνία ( $NH_4^+$ ). Συνήθως χαρακτηρίζεται από τη μάζα του αζώτου.
- $S_{NO_2}$ : Νιτρώδες άζωτο ( $NO_2^-$ ). Συνήθως χαρακτηρίζεται από τη μάζα του αζώτου.
- $S_{NO_3}$ : Νιτρικό άζωτο ( $NO_3^-$ ). Συνήθως χαρακτηρίζεται από τη μάζα του αζώτου.

- $S_{HPO4}$ : Ανόργανος διαλυμένος φωσφόρος ( $HPO_4^{-2}$ ). Συνήθως χαρακτηρίζεται από τη μάζα του φωσφόρου.
- $S_{O2}$ : Διαλυμένο οξυγόνο  $O_2$ .
- $X_H$ : Ετεροτροφικοί οργανισμοί οι οποίοι θεωρείται ότι μπορούν να αναπτύσσονται τόσο σε αερόβιες όσο και σε ανοξικές συνθήκες (με μικρότερη ταχύτητα). Η σύνθεση τους χαρακτηρίζεται από  $\alpha_{C,H}$ ,  $\alpha_{H,H}$ ,  $\alpha_{O,H}$ ,  $\alpha_{N,H}$ ,  $\alpha_{P,H}$ ,  $\alpha_{X,H}$ .
- $X_{N1}$ : Οργανισμοί που οξειδώνουν την αμμωνία σε νιτρώδη. Η σύνθεση τους χαρακτηρίζεται από  $\alpha_{C,N1}$ ,  $\alpha_{H,N1}$ ,  $\alpha_{O,N1}$ ,  $\alpha_{N,N1}$ ,  $\alpha_{P,N1}$ ,  $\alpha_{X,N1}$ .
- $X_{N2}$ : Οργανισμοί που οξειδώνουν τα νιτρώδη σε νιτρικά. Η σύνθεση τους χαρακτηρίζεται από  $\alpha_{C,N2}$ ,  $\alpha_{H,N2}$ ,  $\alpha_{O,N2}$ ,  $\alpha_{N,N2}$ ,  $\alpha_{P,N2}$ ,  $\alpha_{X,N2}$ .
- $X_{ALG}$ : Άλγη και μακρόφυτα. Στο μοντέλο περιλαμβάνεται μια μόνο κλάση αλγών και μακροφύτων. Η σύνθεση τους χαρακτηρίζεται από  $\alpha_{C,ALG}$ ,  $\alpha_{H,ALG}$ ,  $\alpha_{O,ALG}$ ,  $\alpha_{N,ALG}$ ,  $\alpha_{P,ALG}$ ,  $\alpha_{X,ALG}$ .
- $X_S$ : Σωματιδιακή οργανική ύλη οι οποίες θεωρούνται διαθέσιμες για αποδόμηση μόνο αφού υποστούν υδρόλυση. Αυτές οι ουσίες πρέπει να υποστούν υδρόλυση η οποία καταλύεται από ετεροτροφικούς οργανισμούς πριν να μπορούν να καταναλωθούν από του μικροοργανισμούς. Η σύνθεση τους χαρακτηρίζεται από  $\alpha_{C,XS}$ ,  $\alpha_{H,XS}$ ,  $\alpha_{O,XS}$ ,  $\alpha_{N,XS}$ ,  $\alpha_{P,XS}$ ,  $\alpha_{X,XS}$ .
- $X_I$ : Αδρανής οργανική σωματιδιακή ύλη. Αυτές οι ουσίες θεωρούνται μη βιοδιασπάσιμες μέσα στο χρονικό πλαίσιο που εξετάζεται. Η σύνθεση τους χαρακτηρίζεται από  $\alpha_{C,XI}$ ,  $\alpha_{H,XI}$ ,  $\alpha_{O,XI}$ ,  $\alpha_{N,XI}$ ,  $\alpha_{P,XI}$ ,  $\alpha_{X,XI}$ .

## 5.4 Διεργασίες του ποιοτικού μοντέλου

Ο Πίνακας 2 παρουσιάζει ποιοτικά όλες τις διεργασίες που λαμβάνονται υπόψη στο μοντέλο και τις ουσίες τις οποίες επηρεάζουν. Σε στήλες έχουν γραφεί οι ουσίες που προσομοιώνονται στο μοντέλο, και σε γραμμές οι διεργασίες. Ο συντελεστής (+) δείχνει ότι η συγκεκριμένη διεργασία οδηγεί σε αύξηση της συγκέντρωσης της αντίστοιχης ουσίας, ο συντελεστής (-) δείχνει μείωση της συγκέντρωσης ενώ ο συντελεστής (?) δείχνει ότι η επίδραση της διεργασίας στην ουσία, εξαρτάται από τη στοιχειομετρική σύνθεση των οργανικών ουσιών που συμμετέχουν σε αυτή. Οι ακριβείς συντελεστές που έχουν χρησιμοποιηθεί στο μοντέλο παρουσιάζονται στο Παράρτημα.

Οι στοιχειομετρικές παράμετροι που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο παρουσιάζονται στον Πίνακα Πίνακας 3, ενώ ο Πίνακας 4 παρουσιάζει τις κινητικές παραμέτρους. Οι τιμές των παραμέτρων αυτών που προτείνονται από το μοντέλο, παρουσιάζονται επίσης στο Παράρτημα.

Πίνακας 2: Ποιοτικός στοιχειομετρικός πίνακας των διεργασιών που εξετάζονται στο μοντέλο

Ουσία →	i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
j	Διεργασία ↓	$S_S$	$S_I$	$S_{NH4}$	$S_{NO2}$	$S_{NO3}$	$S_{HPO4}$	$S_{O2}$	$X_H$	$X_{N1}$	$X_{N2}$	$X_{ALG}$	$X_S$	$X_I$
1a	Αερόβια ανάπτυξη ετεροτροφικών με $NH_4$	-		?			?	-	1					
1b	Αερόβια ανάπτυξη ετεροτροφικών με $NO_3$	-				-	?	-	1					
2	Αερόβια ενδογενής αναπνοή ετεροτροφικών			+			+	-	-1					+
3a	Ανοξική ανάπτυξη ετεροτροφικών με $NO_3$	-			+	-	?		1					

3b	Ανοξική ανάπτυξη ετεροτροφικών με NO2	-			-		?		1				
4	Ανοξική ενδογενής αναπνοή ετεροτροφικών			+		-	+		-1				+
5	Ανάπτυξη νιτροποιητών 1 <sup>ου</sup> σταδίου			-	+		-	-		1			
6	Αερόβια αναπνοή νιτροποιητών 1 <sup>ου</sup> σταδίου			+			+	-		-1			+
7	Ανάπτυξη νιτροποιητών 2 <sup>ου</sup> σταδίου				-	+	-	-			1		
8	Αερόβια αναπνοή νιτροποιητών 2 <sup>ου</sup> σταδίου			+			+	-			-1		+
9a	Ανάπτυξη αλγών με NH4			-			-	+				1	
9b	Ανάπτυξη αλγών με NO3					-	-	+				1	
10	Αερόβια ενδογενής αναπνοή αλγών			+			+	-				-1	+
11	Θάνατος αλγών			+			+	+				-1	+
12	Υδρόλυση	+		+			+	+					-1

Πίνακας 3: Στοιχειομετρικές παράμετροι του μοντέλου

Σύμβολο	Περιγραφή	Μονάδες
$Y_{H,aer}$	Συντελεστής απόδοσης για την αερόβια ανάπτυξη των ετεροτροφικών	$gX_H/gS_S$
$Y_{H,anox,NO_3}$	Συντελεστής απόδοσης για την ανοξική ανάπτυξη των ετεροτροφικών με νιτρικά	$gX_H/gS_S$
$Y_{H,anox,NO_2}$	Συντελεστής απόδοσης για την ανοξική ανάπτυξη των ετεροτροφικών με νιτρώδη	$gX_H/gS_S$
$f_{i,BAC}$	Κλάσμα της ετεροτροφικής και αυτοτροφικής βιομάζας που καθίσταται αδρανής κατά τη διαδικασία της αναπνοής	$gX_I/gX_H$
$Y_{N1}$	Συντελεστής απόδοσης για την ανάπτυξη των νιτροποιητών 1 <sup>ου</sup> σταδίου	$gX_{N1}/gS_{NH_4-N}$
$Y_{N2}$	Συντελεστής απόδοσης για την ανάπτυξη των νιτροποιητών 2 <sup>ου</sup> σταδίου	$gX_{N2}/gS_{NO_2-N}$
$f_{i,ALG}$	Κλάσμα της σωματιδιακής οργανικής ύλης που καθίσταται αδρανής κατά το θάνατο των αλγών	$gX_I/g(X_S+X_I)$
$Y_{ALG,death}$	Συντελεστής απόδοσης για το θάνατο των αλγών	$g(X_S+X_I)/gX_{ALG}$
$Y_{HYD}$	Συντελεστής απόδοσης για την υδρόλυση	$gS_S/gX_S$

Πίνακας 4: Κινητικές παράμετροι του μοντέλου

Σύμβολο	Περιγραφή	Μονάδες
$k_{\text{death,ALG,To}}$	Ρυθμός θανάτου των αλγών	$T^{-1}$
$k_{\text{grow,ALG,To}}$	Μέγιστος ρυθμός ανάπτυξης για τα άλγη	$T^{-1}$
$k_{\text{grow,H,aer,To}}$	Μέγιστος ρυθμός ανάπτυξης ετεροτροφικών υπό αερόβιες συνθήκες	$T^{-1}$
$k_{\text{grow,H,anox,To}}$	Μέγιστος ρυθμός ανάπτυξης ετεροτροφικών υπό ανοξικές συνθήκες	$T^{-1}$
$k_{\text{grow,N1,To}}$	Μέγιστος ρυθμός ανάπτυξης νιτροποιητών 1 <sup>ου</sup> σταδίου	$T^{-1}$
$k_{\text{grow,N2,To}}$	Μέγιστος ρυθμός ανάπτυξης νιτροποιητών 2 <sup>ου</sup> σταδίου	$T^{-1}$
$k_{\text{hyd,To}}$	Σταθερά ταχύτητας υδρόλυσης	$T^{-1}$
$k_{\text{resp,ALG,To}}$	Μέγιστος ρυθμός ενδογενούς αναπνοής αλγών	$T^{-1}$
$k_{\text{resp,H,aer,To}}$	Μέγιστος ρυθμός αερόβιας αναπνοής ετεροτροφικών	$T^{-1}$
$k_{\text{resp,H,anox,To}}$	Μέγιστος ρυθμός ανοξικής αναπνοής ετεροτροφικών	$T^{-1}$
$k_{\text{resp,N1,To}}$	Μέγιστος ρυθμός αναπνοής νιτροποιητών 1 <sup>ου</sup> σταδίου	$T^{-1}$
$k_{\text{resp,N2,To}}$	Μέγιστος ρυθμός αναπνοής νιτροποιητών 2 <sup>ου</sup> σταδίου	$T^{-1}$
$K_{\text{HPO4,ALG}}$	Σταθερά κορεσμού για την ανάπτυξη των αλγών με φώσφορο	$ML^{-3}$
$K_{\text{HPO4,H,aer}}$	Σταθερά κορεσμού για την αερόβια ανάπτυξη των ετεροτροφικών με φώσφορο	$ML^{-3}$
$K_{\text{HPO4,H,anox}}$	Σταθερά κορεσμού για την ανοξική ανάπτυξη των ετεροτροφικών με φώσφορο	$ML^{-3}$
$K_{\text{HPO4,N1}}$	Σταθερά κορεσμού για την αερόβια ανάπτυξη των νιτροποιητών 1 <sup>ου</sup> σταδίου με φώσφορο	$ML^{-3}$
$K_{\text{HPO4,N2}}$	Σταθερά κορεσμού για την αερόβια ανάπτυξη των νιτροποιητών 2 <sup>ου</sup> σταδίου με φώσφορο	$ML^{-3}$
$K_{\text{N,ALG}}$	Σταθερά κορεσμού για την ανάπτυξη των αλγών με άζωτο	$ML^{-3}$
$K_{\text{NH4,ALG}}$	Σταθερά κορεσμού για την ανάπτυξη των αλγών με αμμωνία	$ML^{-3}$
$K_{\text{N,H,aer}}$	Σταθερά κορεσμού για την αερόβια ανάπτυξη ετεροτροφικών με άζωτο	$ML^{-3}$
$K_{\text{NH4,N1}}$	Σταθερά κορεσμού για την ανάπτυξη των νιτροποιητών 1 <sup>ου</sup> σταδίου με αμμωνία	$ML^{-3}$
$K_I$	Σταθερά κορεσμού για την ανάπτυξη των αλγών με ηλιακή ακτινοβολία	$EL^{-2}$
$K_{\text{NO3,H,anox}}$	Σταθερά κορεσμού για την ανοξική ανάπτυξη των ετεροτροφικών με νιτρικά	$ML^{-3}$

$K_{NO_2,H,anox}$	Σταθερά κορεσμού για την ανοξική ανάπτυξη των ετεροτροφικών με νιτρώδη	$ML^{-3}$
$K_{NO_2,N_2}$	Σταθερά κορεσμού για την ανάπτυξη των νιτροποιητών 2 <sup>ου</sup> σταδίου με νιτρώδη	$ML^{-3}$
$K_{O_2,ALG}$	Σταθερά κορεσμού/αναστολής για την ενδογενή αναπνοή των αλγών	$ML^{-3}$
$K_{O_2,H,aer}$	Σταθερά κορεσμού/αναστολής για την αερόβια ενδογενή αναπνοή των ετεροτροφικών	$ML^{-3}$
$K_{O_2,N_1}$	Σταθερά κορεσμού/αναστολής για την αερόβια ενδογενή αναπνοή των νιτροποιητών 1 <sup>ου</sup> σταδίου	$ML^{-3}$
$K_{O_2,N_2}$	Σταθερά κορεσμού/αναστολής για την αερόβια ενδογενή αναπνοή των νιτροποιητών 2 <sup>ου</sup> σταδίου	$ML^{-3}$
$K_{S,H,aer}$	Σταθερά κορεσμού για την αερόβια ανάπτυξη των ετεροτροφικών με διαλυμένο οργανικό υπόστρωμα	$ML^{-3}$
$K_{S,H,anox}$	Σταθερά κορεσμού για την ανοξική ανάπτυξη των ετεροτροφικών με διαλυμένο οργανικό υπόστρωμα	$ML^{-3}$
$\beta_{ALG}$	Θερμοκρασιακός συντελεστής διόρθωσης για την ταχύτητα ανάπτυξης των αλγών	$^{\circ}C^{-1}$
$\beta_H$	Θερμοκρασιακός συντελεστής διόρθωσης για την ταχύτητα ανάπτυξης των ετεροτροφικών	$^{\circ}C^{-1}$
$\beta_{hyd}$	Θερμοκρασιακός συντελεστής διόρθωσης για την ταχύτητα υδρόλυσης	$^{\circ}C^{-1}$
$\beta_{N_1}$	Θερμοκρασιακός συντελεστής διόρθωσης για την ταχύτητα ανάπτυξης των νιτροποιητών 1 <sup>ου</sup> σταδίου	$^{\circ}C^{-1}$
$\beta_{N_2}$	Θερμοκρασιακός συντελεστής διόρθωσης για την ταχύτητα ανάπτυξης των νιτροποιητών 2 <sup>ου</sup> σταδίου	$^{\circ}C^{-1}$

Στις επόμενες παραγράφους παρουσιάζονται επιγραμματικά όλες οι διεργασίες και οι αντίστοιχοι ρυθμοί τους.

(1) Αερόβια ανάπτυξη ετεροτροφικών: Ανάπτυξη των ετεροτροφικών οργανισμών με κατανάλωση διαλυμένου οργανικού υποστρώματος, διαλυμένου οξυγόνου και θρεπτικών. Εάν το οργανικό υπόστρωμα περιέχει αρκετό φώσφορο ( $\alpha_{P,XH} < Y_{H,aer} \cdot \alpha_{P,SS}$ ), τότε δε χρειάζεται προσρόφηση φωσφόρου από το νερό και ο αντίστοιχος περιοριστικός όρος για το φώσφορο μπορεί να παραληφθεί. Εάν δεν υπάρχει αρκετό άζωτο στο οργανικό υπόστρωμα ( $\alpha_{N,XH} < Y_{H,aer} \cdot \alpha_{N,SS}$ ), τότε υπάρχει κατανάλωση αμμωνίας από τη διαδικασία (1a). Εάν οι συγκεντρώσεις της αμμωνίας γίνουν πολύ χαμηλές, μέσω κατάλληλου διακόπτη  $\left( \frac{S_{NH_4}}{K_{N,H,aer} + S_{NH_4}} \right)$ , ενεργοποιείται η κατανάλωση νιτρικών. Ο ρυθμός της αερόβιας ανάπτυξης ετεροτροφικών με  $NH_4$  (1a) είναι:

$$R_{\text{gro,H,aer,NH4}} = k_{\text{gro,H,aer,T}_0} \cdot e^{\beta_H \cdot (T-T_0)} \cdot \frac{S_S}{K_{S,H,aer} + S_S} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2,H,aer} + S_{O_2}} \cdot \left[ \frac{S_{\text{NH}_4}}{K_{N,H,aer} + S_{\text{NH}_4}} \right] \cdot \left[ \frac{S_{\text{HPO}_4}}{K_{\text{HPO}_4,H,aer} + S_{\text{HPO}_4}} \right] \cdot X_H \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.8)$$

ενώ η ταχύτητα της ανάπτυξης με NO<sub>3</sub> (1b) δίνεται από τη σχέση:

$$R_{\text{gro,H,aer,NH4}} = k_{\text{gro,H,aer,T}_0} \cdot e^{\beta_H \cdot (T-T_0)} \cdot \frac{S_S}{K_{S,H,aer} + S_S} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2,H,aer} + S_{O_2}} \cdot \frac{K_{N,H,aer}}{K_{N,H,aer} + S_{\text{NH}_4}} \cdot \frac{S_{\text{NO}_3}}{K_{N,H,aer} + S_{\text{NO}_3}} \cdot \left[ \frac{S_{\text{HPO}_4}}{K_{\text{HPO}_4,H,aer} + S_{\text{HPO}_4}} \right] \cdot X_H \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.9)$$

(2) Αερόβια ενδογενής αναπνοή: Μείωση της βιομάζας μέσω της αερόβιας ενδογενούς αναπνοής. Η ταχύτητα της διεργασίας αυτής δίνεται από τη σχέση:

$$R_{\text{resp,H,aer}} = k_{\text{resp,H,aer,T}_0} \cdot e^{\beta_H \cdot (T-T_0)} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2,H,aer} + S_{O_2}} \cdot X_H \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.10)$$

(3) Ανοξική ανάπτυξη ετεροτροφικών: Ανάπτυξη ετεροτροφικών οργανισμών με οξυγόνο που προέρχεται είτε από την αναγωγή των νιτρικών (NO<sub>3</sub>) σε νιτρώδη (NO<sub>2</sub>), είτε από την αναγωγή των νιτρωδών (NO<sub>2</sub>) σε μοριακό άζωτο (απονιτροποίηση; διεργασίες (3a) και (3b) αντίστοιχα). Αυτή η διαδικασία εμποδίζεται μέσω κατάλληλου διακόπτη  $\left( \frac{K_{O_2,H,aer}}{K_{O_2,H,aer} + S_{O_2}} \right)$ , από την παρουσία οξυγόνου.

Ο ρυθμός της πρώτης διεργασίας (3a) υπολογίζεται από τη σχέση:

$$R_{\text{gro,H,anox}} = k_{\text{gro,H,anox,T}_0} \cdot e^{\beta_H \cdot (T-T_0)} \cdot \frac{S_S}{K_{S,H,anox} + S_S} \cdot \frac{K_{O_2,H,aer}}{K_{O_2,H,aer} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{\text{NO}_3}}{K_{\text{NO}_3,H,aer} + S_{\text{NO}_3}} \cdot \left[ \frac{S_{\text{HPO}_4}}{K_{\text{HPO}_4,H,anox} + S_{\text{HPO}_4}} \right] \cdot X_H \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.11)$$

ενώ της δεύτερης διεργασίας (3b) από την:

$$R_{\text{gro,H,anox}} = k_{\text{gro,H,anox,T}_0} \cdot e^{\beta_H \cdot (T-T_0)} \cdot \frac{S_S}{K_{S,H,anox} + S_S} \cdot \frac{K_{O_2,H,aer}}{K_{O_2,H,aer} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{\text{NO}_2}}{K_{\text{NO}_2,H,aer} + S_{\text{NO}_2}} \cdot \left[ \frac{S_{\text{HPO}_4}}{K_{\text{HPO}_4,H,anox} + S_{\text{HPO}_4}} \right] \cdot X_H \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.12)$$



(4) Ανοξική ενδογενής αναπνοή ετεροτροφικών: Πρόκειται για τη μείωση της βιομάζας των ετεροτροφικών μέσω της ανοξικής ενδογενούς αναπνοής όταν απουσιάζει το διαλυμένο οξυγόνο. Το απαραίτητο σε αυτή την περίπτωση οξυγόνο προέρχεται από την αναγωγή των νιτρικών σε μοριακό άζωτο. Η διεργασία αυτή εμποδίζεται από την παρουσία οξυγόνου μέσω του διακόπτη

$\frac{K_{O_2,H,aer}}{K_{O_2,H,aer} + S_{O_2}}$ . Η ταχύτητα της διεργασίας δίνεται από τη σχέση:

$$R_{resp,H,anox} = k_{resp,H,anox,T_0} \cdot e^{\beta_H \cdot (T-T_0)} \cdot \frac{K_{O_2,H,aer}}{K_{O_2,H,aer} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NO_3}}{K_{NO_3,H,anox} + S_{NO_3}} \cdot X_H \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.13)$$

(5) Ανάπτυξη νιτροποιητών 1<sup>ου</sup> σταδίου: Ανάπτυξη οργανισμών που οξειδώνουν την αμμωνία σε νιτρώδη με ταυτόχρονη κατανάλωση διαλυμένου οξυγόνου. Η ταχύτητα της διεργασίας υπολογίζεται από την:

$$R_{gro,N1} = k_{gro,N1,T_0} \cdot e^{\beta_{N1} \cdot (T-T_0)} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2,N1} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4,N1} + S_{NH_3}} \cdot \frac{S_{HPO_4}}{K_{HPO_4,N1} + S_{HPO_4}} \cdot X_{N1} \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.14)$$

(6) Αερόβια ενδογενής αναπνοή νιτροποιητών 1<sup>ου</sup> σταδίου: Μείωση της βιομάζας των νιτροποιητών πρώτου σταδίου μέσω της αερόβιας ενδογενούς αναπνοής, με ταυτόχρονη κατανάλωση οξυγόνου και απελευθέρωση αζώτου και φωσφόρου. Ο ρυθμός της ενδογενούς αναπνοής δίνεται από τη σχέση:

$$R_{resp,N1} = k_{resp,N1,T_0} \cdot e^{\beta_{N1} \cdot (T-T_0)} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2,N1} + S_{O_2}} \cdot X_{N1} \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.15)$$

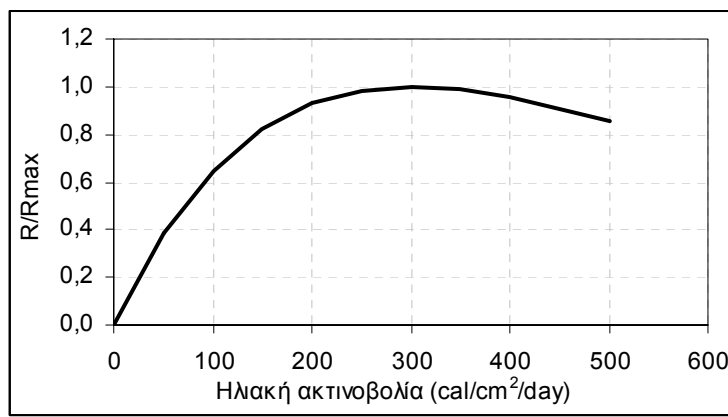
(7) Ανάπτυξη νιτροποιητών 2<sup>ου</sup> σταδίου: Ανάπτυξη οργανισμών που οξειδώνουν τα νιτρώδη σε νιτρικά με κατανάλωση διαλυμένου οξυγόνου. Για την αποφυγή προβλημάτων σε περίπτωση απουσίας αμμωνίας, πηγή αζώτου για την ανάπτυξη θεωρούνται τα νιτρώδη. Η ταχύτητα της διεργασίας υπολογίζεται από την:

$$R_{gro,N2} = k_{gro,N2,T_0} \cdot e^{\beta_{N2} \cdot (T-T_0)} \cdot \frac{S_{O_2}}{K_{O_2,N2} + S_{O_2}} \cdot \frac{S_{NO_2}}{K_{NO_2,N2} + S_{NO_2}} \cdot \frac{S_{HPO_4}}{K_{HPO_4,N2} + S_{HPO_4}} \cdot X_{N2} \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.16)$$

(8) Αερόβια ενδογενής αναπνοή νιτροποιητών 2<sup>ου</sup> σταδίου: Μείωση της βιομάζας των νιτροποιητών δεύτερου σταδίου μέσω της αερόβιας ενδογενούς αναπνοής, με ταυτόχρονη κατανάλωση οξυγόνου και απελευθέρωση αζώτου και φωσφόρου. Ο ρυθμός της ενδογενούς αναπνοής δίνεται από τη σχέση:

$$R_{\text{resp},N2} = k_{\text{resp},N2,T_0} \cdot e^{\beta_{N2} \cdot (T-T_0)} \cdot \frac{S_{O2}}{K_{O2,N2} + S_{O2}} \cdot X_{N2} \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.17)$$

(9) Ανάπτυξη αλγών: Ανάπτυξη αλγών μέσω της διαδικασίας της φωτοσύνθεσης. Η διεργασία αυτή χωρίζεται στην ανάπτυξη των αλγών με πηγή αζώτου την αμμωνία την οποία και προτιμούν και με πηγή αζώτου το νιτρικό άζωτο. Όπως έχει αποδειχτεί από πολλές πειραματικές μελέτες η επίδραση της ηλιακής ακτινοβολίας στο ρυθμό της φωτοσύνθεσης είναι άμεση. Παρόλα αυτά προσεκτική παρατήρηση στη συμπεριφορά των κυττάρων, αποκαλύπτει την ύπαρξη μιας βέλτιστης τιμής της έντασης της ηλιακής ακτινοβολίας, υπέρβαση της οποίας, οδηγεί στην αναχαίτιση του φαινομένου της φωτοσύνθεσης. Η επίδραση αυτή περιγράφεται από τη συνάρτηση  $\frac{I}{K_I} \cdot e^{1-\frac{I}{K_I}}$  (Σχήμα 6).



Σχήμα 6: Επίδραση της ηλιακής ακτινοβολίας στην ταχύτητα της ανάπτυξης των αλγών

Ο ρυθμός της ανάπτυξης αλγών με NH4 δίνεται από τη σχέση:

$$R_{\text{gro,ALG,NH4}} = k_{\text{gro,ALG},T_0} \cdot e^{\beta_{\text{ALG}} \cdot (T-T_0)} \cdot \frac{S_{\text{NH4}} + S_{\text{NO3}}}{K_{\text{N,ALG}} + S_{\text{NH4}} + S_{\text{NO3}}} \cdot \frac{S_{\text{NH4}}}{K_{\text{NH4,ALG}} + S_{\text{NH4}}} \cdot \frac{S_{\text{HPO4}}}{K_{\text{HPO4,ALG}} + S_{\text{HPO4}}} \cdot \frac{I}{K_I} \cdot e^{1-\frac{I}{K_I}} \cdot X_{\text{ALG}} \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.18)$$

ενώ για την ανάπτυξη με χρήση νιτρικών χρησιμοποιείται η σχέση:

$$R_{\text{gro,ALG,NO3}} = k_{\text{gro,ALG},T_0} \cdot e^{\beta_{\text{ALG}} \cdot (T-T_0)} \cdot \frac{S_{\text{NH4}} + S_{\text{NO3}}}{K_{\text{N,ALG}} + S_{\text{NH4}} + S_{\text{NO3}}} \cdot \frac{K_{\text{NH4,ALG}}}{K_{\text{NH4,ALG}} + S_{\text{NH4}}} \cdot \frac{S_{\text{HPO4}}}{K_{\text{HPO4,ALG}} + S_{\text{HPO4}}} \cdot \frac{I}{K_I} \cdot e^{1-\frac{I}{K_I}} \cdot X_{\text{ALG}} \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.19)$$

όπου

I ένταση ηλιακής ακτινοβολίας (cal/cm²/day)

(10) Αερόβια ενδογενής αναπνοή αλγών: Μείωση της βιομάζας των αλγών μέσω της αερόβιας ενδογενούς αναπνοής. Η ταχύτητα της διαδικασίας είναι:

$$R_{\text{resp,ALG}} = k_{\text{resp,ALG},T_0} \cdot e^{\beta_{\text{ALG}} \cdot (T-T_0)} \cdot \frac{S_{\text{O}_2}}{K_{\text{O}_2,\text{ALG}} + S_{\text{O}_2}} \cdot X_{\text{ALG}} \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.20)$$

(11) Θάνατος αλγών: Μείωση της βιομάζας των αλγών και μετατροπή τους σε αργά βιοδιασπάσιμη και αδρανή οργανική ύλη μέσω του θανάτου, της λύσης κτλ. Ο ρυθμός θανάτου περιγράφεται από τη σχέση:

$$R_{\text{death,ALG}} = k_{\text{death,ALG},T_0} \cdot e^{\beta_{\text{ALG}} \cdot (T-T_0)} \cdot X_{\text{ALG}} \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.21)$$

(15) Υδρόλυση: Μετατροπή της αργά βιοδιασπάσιμης σωματιδιακής οργανικής ύλης σε διαλυμένη οργανική ύλη, μέσω της δράσης ετεροτροφικής βιομάζας και με ρυθμό που δίνεται από τη σχέση:

$$R_{\text{hydro}} = k_{\text{hyd},T_0} \cdot e^{\beta_{\text{hyd}} \cdot (T-T_0)} \cdot X_{\text{S}} \quad (\text{day}^{-1}) \quad (5.22)$$



## 6 Παράρτημα

### 6.1 Εξισώσεις στοιχειομετρικών συντελεστών

Ο Πίνακας 5 παρουσιάζει τους τύπους από τους οποίους υπολογίζονται οι στοιχειομετρικοί συντελεστές των διεργασιών που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο. Οι συντελεστές αυτοί έχουν υπολογιστεί από τις ισορροπίες ηλεκτρικού φορτίου και μάζας των C, H, O, N, P και X.

Πίνακας 5: Στοιχειομετρικοί συντελεστές του μοντέλου

(1a) Αερόβια ανάπτυξη ετεροτροφικών με  $\text{NH}_4^+$

Ουσία	Στοιχειομετρικός συντελεστής	Μονάδες
$S_s$	$-\frac{1}{Y_{H,aer}}$	$\frac{gS_s}{gX_H}$
$S_{NH_4}$	$\left(\frac{\alpha_{N,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{N,XH}\right)$	$\frac{gNH_4^+ - N}{gX_H}$
$S_{HPO_4}$	$\left(\frac{\alpha_{P,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{P,XH}\right)$	$\frac{gHPO_4^{-2} - P}{gX_H}$
$S_{O_2}$	$\left(\frac{\alpha_{O,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{O,XH}\right) - 8\left(\frac{\alpha_{H,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{H,XH}\right) - \frac{8}{3}\left(\frac{\alpha_{C,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{C,XH}\right)$ $+ \frac{12}{7}\left(\frac{\alpha_{N,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{N,XH}\right) - \frac{40}{31}\left(\frac{\alpha_{P,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{P,XH}\right)$ $- 8\left(\beta_+ - \beta_H + \frac{\beta_O}{8}\right)\left(\frac{\alpha_{X,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{X,XH}\right)$	$\frac{gO_2}{gX_H}$
$X_H$	1	$\frac{gX_H}{gX_H}$
X	$\left(\frac{\alpha_{X,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{X,XH}\right)$	$\frac{gX}{gX_H}$

(1b) Αερόβια ανάπτυξη ετεροτροφικών με  $\text{NO}_3^-$

Ουσία	Στοιχειομετρικός συντελεστής	Μονάδες
-------	------------------------------	---------

$S_S$	$-\frac{1}{Y_{H,aer}}$	$\frac{gS_s}{gX_H}$
$S_{NO_3}$	$\left(\frac{\alpha_{N,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{N,XH}\right)$	$\frac{gNO_3^- - N}{gX_H}$
$S_{HPO_4}$	$\left(\frac{\alpha_{P,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{P,XH}\right)$	$\frac{gHPO_4^{-2} - P}{gX_H}$
$S_{O_2}$	$\left(\frac{\alpha_{O,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{O,XH}\right) - 8\left(\frac{\alpha_{H,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{H,XH}\right) - \frac{8}{3}\left(\frac{\alpha_{C,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{C,XH}\right)$ $-\frac{20}{7}\left(\frac{\alpha_{N,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{N,XH}\right) - \frac{40}{31}\left(\frac{\alpha_{P,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{P,XH}\right)$ $-8\left(\beta_+ - \beta_H + \frac{\beta_O}{8}\right)\left(\frac{\alpha_{X,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{X,XH}\right)$	$\frac{gO_2}{gX_H}$
$X_H$	1	$\frac{gX_H}{gX_H}$
$X$	$\left(\frac{\alpha_{X,SS}}{Y_{H,aer}} - \alpha_{X,XH}\right)$	$\frac{gX}{gX_H}$

(2,6,8,10) Αερόβια ενδογενής αναπνοή των  $X_i$  ( $i=H, N1, N2, ALG$ )

Ουσία	Στοιχειομετρικός συντελεστής	Μονάδες
$S_{NH_4}$	$(\alpha_{N,X_i} - f_{l,i} \cdot \alpha_{N,XI})$	$\frac{gNH_4^+ - N}{gX_i}$
$S_{HPO_4}$	$(\alpha_{P,X_i} - f_{l,i} \cdot \alpha_{P,XI})$	$\frac{gHPO_4^{-2} - P}{gX_i}$
$S_{O_2}$	$(\alpha_{O,X_i} - f_{l,i} \cdot \alpha_{O,XI}) - 8(\alpha_{H,X_i} - f_{l,i} \cdot \alpha_{H,XI}) - \frac{8}{3}(\alpha_{C,X_i} - f_{l,i} \cdot \alpha_{C,XI})$ $+\frac{12}{7}(\alpha_{N,X_i} - f_{l,i} \cdot \alpha_{N,XI}) - \frac{40}{31}(\alpha_{P,X_i} - f_{l,i} \cdot \alpha_{P,XI})$ $-8\left(\beta_+ - \beta_H + \frac{\beta_O}{8}\right)(\alpha_{X,X_i} - f_{l,i} \cdot \alpha_{X,XI})$	$\frac{gO_2}{gX_i}$
$X_i$	-1	$\frac{gX_H}{gX_i}$
$X_I$	$f_{l,i}$	$\frac{gX_I}{gX_i}$

$$X \quad \left( \alpha_{X,X_i} - f_{i,i} \cdot \alpha_{X,XI} \right) \quad \frac{gX}{gX_i}$$

(3a) Ανοξική ανάπτυξη ετεροτροφικών με  $\text{NO}_3^-$

Ουσία	Στοιχειομετρικός συντελεστής	Μονάδες
$S_s$	$-\frac{1}{Y_{H,anox}}$	$\frac{gS_s}{gX_H}$
$S_{NO_2}$	$-\frac{7}{8} \left( \frac{\alpha_{O,SS}}{Y_{H,anox}} - \alpha_{O,XH} \right) + 7 \left( \frac{\alpha_{H,SS}}{Y_{H,anox}} - \alpha_{H,XH} \right) + \frac{7}{3} \left( \frac{\alpha_{C,SS}}{Y_{H,anox}} - \alpha_{C,XH} \right)$ $+ \frac{5}{2} \left( \frac{\alpha_{N,SS}}{Y_{H,anox}} - \alpha_{N,XH} \right) + \frac{35}{31} \left( \frac{\alpha_{P,SS}}{Y_{H,anox}} - \alpha_{P,XH} \right)$ $+ 7 \left( \beta_+ - \beta_H + \frac{\beta_O}{8} \right) \left( \frac{\alpha_{X,SS}}{Y_{H,anox}} - \alpha_{X,XH} \right)$	$\frac{gNO_2^- - N}{gX_H}$
$S_{NO_3}$	$\frac{7}{8} \left( \frac{\alpha_{O,SS}}{Y_{H,anox}} - \alpha_{O,XH} \right) - 7 \left( \frac{\alpha_{H,SS}}{Y_{H,anox}} - \alpha_{H,XH} \right) - \frac{7}{3} \left( \frac{\alpha_{C,SS}}{Y_{H,anox}} - \alpha_{C,XH} \right)$ $- \frac{3}{2} \left( \frac{\alpha_{N,SS}}{Y_{H,anox}} - \alpha_{N,XH} \right) - \frac{35}{31} \left( \frac{\alpha_{P,SS}}{Y_{H,anox}} - \alpha_{P,XH} \right)$ $- 7 \left( \beta_+ - \beta_H + \frac{\beta_O}{8} \right) \left( \frac{\alpha_{X,SS}}{Y_{H,anox}} - \alpha_{X,XH} \right)$	$\frac{gNO_3^- - N}{gX_H}$
$X_H$	1	$\frac{gX_H}{gX_H}$
X	$\left( \frac{\alpha_{X,SS}}{Y_{H,anox}} - \alpha_{X,XH} \right)$	$\frac{gX}{gX_H}$

(3b) Ανοξική ανάπτυξη ετεροτροφικών με  $\text{NO}_2^-$

Ουσία	Στοιχειομετρικός συντελεστής	Μονάδες
$S_s$	$-\frac{1}{Y_{H,anox}}$	$\frac{gS_s}{gX_H}$

$$\begin{aligned}
S_{\text{NO}_2} & \frac{7}{12} \left( \frac{\alpha_{\text{O,SS}}}{Y_{\text{H,anox}}} - \alpha_{\text{O,XH}} \right) - \frac{14}{3} \left( \frac{\alpha_{\text{H,SS}}}{Y_{\text{H,anox}}} - \alpha_{\text{H,XH}} \right) - \frac{14}{9} \left( \frac{\alpha_{\text{C,SS}}}{Y_{\text{H,anox}}} - \alpha_{\text{C,XH}} \right) - \frac{70}{93} \left( \frac{\alpha_{\text{P,SS}}}{Y_{\text{H,anox}}} - \alpha_{\text{P,XH}} \right) - \frac{14}{3} 7 \left( \beta_+ - \beta_{\text{H}} + \frac{\beta_{\text{O}}}{8} \right) \left( \frac{\alpha_{\text{X,SS}}}{Y_{\text{H,anox}}} - \alpha_{\text{X,XH}} \right) & \frac{\text{gNO}_2^- - \text{N}}{\text{gX}_H} \\
S_{\text{HPO}_4} & \left( \frac{\alpha_{\text{P,SS}}}{Y_{\text{H,anox}}} - \alpha_{\text{P,XH}} \right) & \frac{\text{gHPO}_4^{-2} - \text{P}}{\text{gX}_i} \\
X_{\text{H}} & 1 & \frac{\text{gX}_H}{\text{gX}_H} \\
X & \left( \frac{\alpha_{\text{X,SS}}}{Y_{\text{H,anox}}} - \alpha_{\text{X,XH}} \right) & \frac{\text{gX}}{\text{gX}_H}
\end{aligned}$$

(4) Ανοξική ενδογενής αναπνοή των ετεροτροφικών

Ουσία	Στοιχειομετρικός συντελεστής	Μονάδες
$S_{\text{NH}_4}$	$(\alpha_{\text{N,XH}} - f_{\text{I,i}} \cdot \alpha_{\text{N,XI}})$	$\frac{\text{gNH}_4^+ - \text{N}}{\text{gX}_H}$
$S_{\text{HPO}_4}$	$(\alpha_{\text{P,XH}} - f_{\text{I,i}} \cdot \alpha_{\text{P,XI}})$	$\frac{\text{gHPO}_4^{-2} - \text{P}}{\text{gX}_H}$
$S_{\text{NO}_3}$	$\frac{7}{20}(\alpha_{\text{O,XH}} - f_{\text{I,BAC}} \cdot \alpha_{\text{O,XI}}) - \frac{14}{5}(\alpha_{\text{H,XH}} - f_{\text{I,BAC}} \cdot \alpha_{\text{H,XI}}) - \frac{14}{15}(\alpha_{\text{C,XH}} - f_{\text{I,BAC}} \cdot \alpha_{\text{C,XI}}) + \frac{3}{5}(\alpha_{\text{N,XH}} - f_{\text{I,BAC}} \cdot \alpha_{\text{N,XI}}) - \frac{14}{31}(\alpha_{\text{P,XH}} - f_{\text{I,BAC}} \cdot \alpha_{\text{P,XI}}) - \frac{14}{5} \left( \beta_+ - \beta_{\text{H}} + \frac{\beta_{\text{O}}}{8} \right) (\alpha_{\text{X,XH}} - f_{\text{I,BAC}} \cdot \alpha_{\text{X,XI}})$	$\frac{\text{gO}_2}{\text{gX}_H}$
$X_{\text{H}}$	-1	$\frac{\text{gX}_H}{\text{gX}_H}$
$X_{\text{I}}$	$f_{\text{I,BAC}}$	$\frac{\text{gX}_I}{\text{gX}_H}$
$X$	$(\alpha_{\text{X,XH}} - f_{\text{I,BAC}} \cdot \alpha_{\text{X,XI}})$	$\frac{\text{gX}}{\text{gX}_H}$

(5) Ανάπτυξη νιτροποιητών 1<sup>ου</sup> σταδίου

Ουσία	Στοιχειομετρικός συντελεστής	Μονάδες
-------	------------------------------	---------



$S_{NH4}$	$-\frac{1}{Y_{N1}}$	$\frac{gNH_4^+}{gX_{N1}}$
$S_{NO2}$	$\left(\frac{1}{Y_{N1}} - \alpha_{N,N1}\right)$	$\frac{gNO_2^- - N}{gX_{N1}}$
$S_{HPO4}$	$-(\alpha_{P,N1})$	$\frac{gHPO_4^{-2} - P}{gX_{N1}}$
$S_{O2}$	$-\frac{24}{7} \cdot \frac{1}{Y_{N1}} + \frac{8}{3} \alpha_{C,N1} - \alpha_{O,N1} + \frac{12}{7} \alpha_{N,N1} + \frac{40}{31} \alpha_{P,N1}$ $+ 8 \left( \beta_+ - \beta_H + \frac{\beta_O}{8} \right) \alpha_{X,N1}$	$\frac{gO_2}{gX_{N1}}$
$X_{N1}$	1	$\frac{gX_{N1}}{gX_{N1}}$
$X$	$-\alpha_{X,N1}$	$\frac{gX}{gX_{N1}}$

(7) Ανάπτυξη νιτροποιητών 2<sup>ου</sup> σταδίου

Ουσία	Στοιχειομετρικός συντελεστής	Μονάδες
$S_{NO2}$	$-\frac{1}{Y_{N2}}$	$\frac{gNO_2^- - N}{gX_{N2}}$
$S_{NO3}$	$\left(\frac{1}{Y_{N2}} - \alpha_{N,N2}\right)$	$\frac{gNO_2^- - N}{gX_{N2}}$
$S_{HPO4}$	$-(\alpha_{P,N2})$	$\frac{gHPO_4^{-2} - P}{gX_{N2}}$
$S_{O2}$	$-\frac{8}{7} \cdot \frac{1}{Y_{N2}} + \frac{8}{3} \alpha_{C,N2} - \alpha_{O,N2} + \frac{20}{7} \alpha_{N,N2} + \frac{40}{31} \alpha_{P,N2}$ $+ 8 \left( \beta_+ - \beta_H + \frac{\beta_O}{8} \right) \alpha_{X,N2}$	$\frac{gO_2}{gX_{N1}}$
$X_{N2}$	1	$\frac{gX_{N2}}{gX_{N2}}$
$X$	$-\alpha_{X,N2}$	$\frac{gX}{gX_{N2}}$

(9a) Ανάπτυξη αλγών με NH4

Ουσία	Στοιχειομετρικός συντελεστής	Μονάδες
$S_{NH4}$	$-\alpha_{N,ALG}$	$\frac{gNH_4^+}{gX_{ALG}}$
$S_{HPO4}$	$-\alpha_{P,ALG}$	$\frac{gHPO_4^{-2} - P}{gX_{ALG}}$
$S_{O2}$	$\frac{8}{3}\alpha_{C,ALG} + 8\alpha_{H,ALG} - \alpha_{O,ALG} - \frac{12}{7}\alpha_{N,ALG} + \frac{40}{31}\alpha_{P,ALG}$ $+ 8\left(\beta_+ - \beta_H + \frac{\beta_O}{8}\right)\alpha_{X,ALG}$	$\frac{gO_2}{gX_{ALG}}$
$X_{ALG}$	1	$\frac{gX_{ALG}}{gX_{ALG}}$
X	$-\alpha_{X,ALG}$	$\frac{gX}{gX_{ALG}}$

(9β) Ανάπτυξη αλγών με NO3

Ουσία	Στοιχειομετρικός συντελεστής	Μονάδες
$S_{NO3}$	$-\alpha_{N,ALG}$	$\frac{gNH_4^+}{gX_{ALG}}$
$S_{HPO4}$	$-\alpha_{P,ALG}$	$\frac{gHPO_4^{-2} - P}{gX_{ALG}}$
$S_{O2}$	$\frac{8}{3}\alpha_{C,ALG} + 8\alpha_{H,ALG} - \alpha_{O,ALG} + \frac{20}{7}\alpha_{N,ALG} + \frac{40}{31}\alpha_{P,ALG}$ $+ 8\left(\beta_+ - \beta_H + \frac{\beta_O}{8}\right)\alpha_{X,ALG}$	$\frac{gO_2}{gX_{ALG}}$
$X_{ALG}$	1	$\frac{gX_{ALG}}{gX_{ALG}}$
X	$-\alpha_{X,ALG}$	$\frac{gX}{gX_{ALG}}$

(10) Θάνατος αλγών

Ουσία	Στοιχειομετρικός συντελεστής	Μονάδες
$S_{NH4}$	$\alpha_{N,ALG} - (1 - f_{I,ALG}) \cdot Y_{ALG,death} \cdot \alpha_{N,XS} - f_{I,ALG} \cdot Y_{ALG,death} \cdot \alpha_{N,XI}$	$\frac{gNH_4^+}{gX_{ALG}}$

$S_{\text{HPO4}}$	$\alpha_{\text{P,ALG}} - (1 - f_{\text{I,ALG}}) \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{P,XS}} - f_{\text{I,ALG}} \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{P,XI}}$	$\frac{\text{gHPO}_4^{-2} - \text{P}}{\text{gX}_{\text{ALG}}}$
$S_{\text{O2}}$	$(\alpha_{\text{P,ALG}} - (1 - f_{\text{I,ALG}}) \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{P,XS}} - f_{\text{I,ALG}} \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{P,XI}})$ $- 8(\alpha_{\text{H,ALG}} - (1 - f_{\text{I,ALG}}) \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{H,XS}} - f_{\text{I,ALG}} \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{H,XI}})$ $-\frac{8}{3}(\alpha_{\text{C,ALG}} - (1 - f_{\text{I,ALG}}) \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{C,XS}} - f_{\text{I,ALG}} \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{C,XI}})$ $+\frac{12}{7}(\alpha_{\text{N,ALG}} - (1 - f_{\text{I,ALG}}) \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{N,XS}} - f_{\text{I,ALG}} \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{N,XI}})$ $-\frac{40}{31}(\alpha_{\text{P,ALG}} - (1 - f_{\text{I,ALG}}) \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{P,XS}} - f_{\text{I,ALG}} \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{P,XI}})$ $+ 8\left(\beta_+ - \beta_{\text{H}} + \frac{\beta_{\text{O}}}{8}\right)$ $\cdot (\alpha_{\text{X,ALG}} - (1 - f_{\text{I,ALG}}) \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{X,XS}} - f_{\text{I,ALG}} \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{X,XI}})$	$\frac{\text{gO}_2}{\text{gX}_{\text{ALG}}}$
$X_{\text{ALG}}$	-1	$\frac{\text{gX}_{\text{ALG}}}{\text{gX}_{\text{ALG}}}$
$X_{\text{S}}$	$(1 - f_{\text{I,ALG}}) \cdot Y_{\text{ALG,death}}$	$\frac{\text{gX}_{\text{S}}}{\text{gX}_{\text{ALG}}}$
$X_{\text{I}}$	$f_{\text{I,ALG}} \cdot Y_{\text{ALG,death}}$	$\frac{\text{gX}_{\text{I}}}{\text{gX}_{\text{ALG}}}$
$X$	$\alpha_{\text{X,ALG}} - (1 - f_{\text{I,ALG}}) \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{X,XS}} - f_{\text{I,ALG}} \cdot Y_{\text{ALG,death}} \cdot \alpha_{\text{X,XI}}$	$\frac{\text{gX}}{\text{gX}_{\text{ALG}}}$

(12) Υδρόλυση

Ουσία	Στοιχειομετρικός συντελεστής	Μονάδες
$S_{\text{S}}$	$Y_{\text{HYD}}$	$\frac{\text{gS}_{\text{S}}}{\text{gX}_{\text{S}}}$
$S_{\text{NH4}}$	$\alpha_{\text{N,XS}} - Y_{\text{HYD}} \cdot \alpha_{\text{N,SS}}$	$\frac{\text{gNH}_4^+}{\text{gX}_{\text{S}}}$
$S_{\text{HPO4}}$	$\alpha_{\text{P,XS}} - Y_{\text{HYD}} \cdot \alpha_{\text{P,SS}}$	$\frac{\text{gHPO}_4^{-2} - \text{P}}{\text{gX}_{\text{S}}}$

$$\begin{aligned}
S_{O_2} & (\alpha_{O,XS} - Y_{HYD} \cdot \alpha_{O,SS}) - 8(\alpha_{H,XS} - Y_{HYD} \cdot \alpha_{H,SS}) & \frac{gO_2}{gX_s} \\
& - \frac{8}{3}(\alpha_{C,XS} - Y_{HYD} \cdot \alpha_{C,SS}) + \frac{12}{7}(\alpha_{N,XS} - Y_{HYD} \cdot \alpha_{N,SS}) \\
& - \frac{40}{31}(\alpha_{P,XS} - Y_{HYD} \cdot \alpha_{P,SS}) \\
& - 8\left(\beta_+ - \beta_H + \frac{\beta_O}{8}\right)(\alpha_{X,XS} - Y_{HYD} \cdot \alpha_{X,SS}) \\
X_s & -1 & \frac{gX_s}{gX_s} \\
X & \alpha_{X,XS} - Y_{HYD} \cdot \alpha_{X,SS} & \frac{gX}{gX_s}
\end{aligned}$$

## 6.2 Προτεινόμενες τιμές παραμέτρων του μοντέλου

Οι επόμενοι πίνακες παρουσιάζουν παραδείγματα αριθμητικών τιμών για τους συντελεστές και τις παραμέτρους που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο. Στον Πίνακα Πίνακας 6 παρουσιάζονται τιμές για τα κλάσματα μάζας των στοιχείων C, H, O, N, P και X στις διάφορες οργανικές ουσίες που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο. Στους Πίνακες Πίνακας 7 και Πίνακας 8 παρατίθενται οι συνηθέστερα χρησιμοποιούμενες τιμές των στοιχειομετρικών και κινητικών παραμέτρων του μοντέλου αντίστοιχα.

Πίνακας 6: Κλάσματα μάζας των οργανικών ουσιών του μοντέλου

	S <sub>S</sub>	S <sub>I</sub>	X <sub>H</sub>	X <sub>N1</sub>	X <sub>N2</sub>	X <sub>ALG</sub>	X <sub>S</sub>	X <sub>I</sub>	Μονάδες
α <sub>C</sub>	0,57	0,61	0,52	0,52	0,52	0,36	0,57	0,61	$\frac{gC}{gOM}$
α <sub>H</sub>	0,08	0,07	0,08	0,08	0,08	0,07	0,08	0,07	$\frac{gH}{gOM}$
α <sub>O</sub>	0,28	0,28	0,25	0,25	0,25	0,50	0,28	0,28	$\frac{gO}{gOM}$
α <sub>N</sub>	0,06	0,03	0,12	0,12	0,12	0,06	0,06	0,03	$\frac{gN}{gOM}$
α <sub>P</sub>	0,01	0,01	0,03	0,03	0,03	0,01	0,01	0,01	$\frac{gP}{gOM}$
α <sub>X</sub>	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	$\frac{gX}{gOM}$

Πίνακας 7: Τιμές στοιχειομετρικών παραμέτρων του μοντέλου

Σύμβολο	Τιμή	Μονάδες
$Y_{H,aer}$	0,60	$gX_H/gS_S$
$Y_{H,anox,NO_3}$	0,50	$gX_H/gS_S$
$Y_{H,anox,NO_2}$	0,30	$gX_H/gS_S$
$f_{i,BAC}$	0,20	$gX_I/gX_H$
$Y_{N1}$	0,13	$gX_{N1}/gS_{NH_4-N}$
$Y_{N2}$	0,03	$gX_{N2}/gS_{NO_2-N}$
$f_{i,ALG}$	0,20	$gX_I/(X_S+X_I)$
$Y_{ALG,death}$	0,62	$g(X_S+X_I)/gX_{ALG}$
$Y_{HYD}$	1,00	$gS_S/gX_S$

Πίνακας 8: Τιμές κινητικών παραμέτρων του μοντέλου

Σύμβολο	Τιμή	Μονάδες
$k_{death,ALG,To}$	0,1	$day^{-1}$
$k_{grow,ALG,To}$	2,0	$day^{-1}$
$k_{grow,H,aer,To}$	2,0	$day^{-1}$
$k_{grow,H,anox,To}$	1,6	$day^{-1}$
$k_{grow,N1,To}$	0,8	$day^{-1}$
$k_{grow,N2,To}$	1,1	$day^{-1}$
$k_{hyd,To}$	3,0	$day^{-1}$
$k_{resp,ALG,To}$	0,1	$day^{-1}$
$k_{resp,H,aer,To}$	0,2	$day^{-1}$
$k_{resp,H,anox,To}$	0,1	$day^{-1}$
$k_{resp,N1,To}$	0,05	$day^{-1}$
$k_{resp,N2,To}$	0,05	$day^{-1}$

Σύμβολο	Τιμή	Μονάδες
$K_{NH_4,ALG}$	0,1	$gN/m^3$
$K_{N,H,aer}$	0,2	$gN/m^3$
$K_{NH_4,N1}$	0,5	$gN/m^3$
$K_I$	300	$cal/cm^2/day$
$K_{NO_3,H,anox}$	0,5	$gN/m^3$
$K_{NO_2,H,anox}$	0,2	$gN/m^3$
$K_{NO_2,N2}$	0,5	$gN/m^3$
$K_{O_2,ALG}$	0,2	$gO/m^3$
$K_{O_2,H,aer}$	0,5	$gO/m^3$
$K_{O_2,N1}$	0,5	$gO/m^3$
$K_{O_2,N2}$	0,5	$gO/m^3$
$K_{S,H,aer}$	2,0	$gCOD/m^3$

$K_{\text{HPO4,ALG}}$	0,02	$\text{gP/m}^3$
$K_{\text{HPO4,H,aer}}$	0,02	$\text{gP/m}^3$
$K_{\text{HPO4,H,anox}}$	0,02	$\text{gP/m}^3$
$K_{\text{HPO4,N1}}$	0,02	$\text{gP/m}^3$
$K_{\text{HPO4,N2}}$	0,02	$\text{gP/m}^3$
$K_{\text{N,ALG}}$	0,1	$\text{gN/m}^3$

$K_{\text{S,H,anox}}$	2,0	$\text{gCOD/m}^3$
$\beta_{\text{ALG}}$	0,046	$^{\circ}\text{C}^{-1}$
$\beta_{\text{H}}$	0,07	$^{\circ}\text{C}^{-1}$
$\beta_{\text{hyd}}$	0,07	$^{\circ}\text{C}^{-1}$
$\beta_{\text{N1}}$	0,098	$^{\circ}\text{C}^{-1}$
$\beta_{\text{N2}}$	0,098	$^{\circ}\text{C}^{-1}$

## Βιβλιογραφία

---

- Κωτσοβίνος Ν., *Ρευστομηχανική*, Ξάνθη, 1999
- Σούλης Ι., *Υδραυλική Ανοιχτών Αγωγών*, Δημοκρίτειο Πανεπιστήμιο Θράκης, 1999
- Σούλης Ι., *Υπολογιστική Μηχανική Ρευστών*, Ξάνθη, 1986
- Τερζίδης Γ. , *Μαθήματα Υδραυλικής, Τόμος 3, Ανοικτοί Αγωγοί*, Θεσσαλονίκη
- Χριστούλας Δ., Ανδρεαδάκης Α., Αραβαντινός Α., Καββαδάς Μ., Σταθόπουλος Α., Στάμου Α., Χατζημπίρος Κ., *Περιβαλλοντική Τεχνολογία*, ΕΜΠ, Αθήνα, 2000
- Abbott, M. B. and Basco, D. R., *Computational Fluid Dynamics - An Introduction for Engineers*, Longman Scientific & Technical, 1994
- Abbott, M.B. and Ionescu, F., *On the numerical computation of nearly-horizontal flows*, J.Hyd.Res., 5, pp.97-117, 1967
- Bellos, C., *Analysis and Simplifications of the Flood Propagation Equations, Report for the FRIMAR Project*, Xanthi-Greece, 1995
- Chow, V.T., *Open-Channel Hydraulics*, McGraw Hill, 1959
- Cunge, Holly, Verwey, *Practical Aspects of Computational River Hydraulics*, Great Britain, 1980
- Kutija, V., *On the Numerical Modelling of Supercritical Flow*, Journal of Hydraulic Research, Vol. 31, No. 6, pp.841-848, 1993
- Orlob G.T., *Mathematical Modelling of Water Quality: Streams, Lakes and Reservoirs*, J. Willey and Sons, 1983
- Reichert P., Borchardt D., Henze M., Rauch W., Shanahan P., Somlyody L., Vanrolleghem P., *River Water Quality Model No. 1*, Scientific and Technical Report No. 12, IWA, 2001