ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ Δ.Π.Θ.

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΥΔΡΑΥΛΙΚΗ

ΣΥΝΟΠΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ ΚΑΙ ΑΣΚΗΣΕΙΣ

ΕΑΡΙΝΟ ΕΞΑΜΗΝΟ 2008-2009

ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ ΜΟΥΤΣΟΠΟΥΛΟΣ

ΕΠΙΚΟΥΡΟΣ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ

1. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΕΞΙΣΩΣΗΣ ΣΥΝΑΓΩΓΗΣ

Αντικείμενο της του σημερινού μαθήματος της παράδοσης «Υπολογιστική Υδραυλική και Μεταφορά Ρύπων», ($9^{ο}$ εξάμηνο του Τμήματος Μηχανικών Περιβάλλοντος του ΔΠΘ), είναι η επίλυση της μονοδιάστατης εξίσωσης συναγωγής:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u\frac{\partial c}{\partial x} = 0$$

Δίνεται σε πρώτη μορφή ένας «ημιτελής» κώδικας Fortran **advection.for** με σκοπό οι συμμετέχοντες να τον συμπληρώσουν. Εναλλακτικά δίνεται η δυνατότητα επίλυσης της ίδιας εξίσωσης με πρόγραμμα Excel.

Στην παραπάνω εξίσωση η ταχύτητα θεωρείται σταθερή, η επίλυση γίνεται σύμφωνα με την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, και σύμφωνα με το αριθμητικό σχήμα FTBS. (Forward in Time Backward in Space), βλέπε:Υπολογιστική Ρευστοδυναμική,Μαρκάτος και Ασημακόπουλος(1995), σ. 40.

$$c_j^{n+1} = \left(1-[Cr]\right)c_j^n + [Cr]c_{j-1}^n$$

όπου:

$$Cr = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \text{ ο αριθμός Courant}$$

Δt το χρονικό βήμα
Δx η αποστάσεις των σημείων του πλέγματος

Ο δείκτης αφορά την διακριτοποίηση στον χώρο (περιγραφή χωρικού σημείου)
Ο εκθέτης αναφέρεται στην χρονική διακριτοποίηση (χρονικό επίπεδο)

Το πρόγραμμα προβλέπει την εισαγωγή αρχικής ρύπανσης με τριγωνική κατανομή, για καλύτερη εξέταση της «ψευτοδιάχυσης», ή «αριθμητικής διάχυσης».

Δεδομένα άσκησης

Ο χώρος που εξετάζεται έχει μήκος $L=20m$, και η ταχύτητα $u=1m/s$. Θα κάνουμε τους υπολογισμούς για χρονική διάρκεια $t=20s$.

Οριακές συνθήκες

Στο ανάντη άκρο της εξεταζόμενης περιοχής η συγκέντρωση είναι μηδέν:

για $x=0$, $c=0$

<u>Αρχικές συνθήκες</u>

Υποθέτουμε ότι στο χρονικό σημείο μηδέν υφίσταται ρύπανση μόνο στην περιοχή 2m<x<6m και το προφίλ της συγκέντρωσης έχει μορφή ισοσκελούς τριγώνου, η δε μέγιστη τιμή της ρύπανσης ισούται με *cmax=1g/l*, και εμφανίζεται σε απόσταση 4m από το ανάντη άκρο.

Πιο συγκεκριμένα υποθέτουμε ότι το προφίλ της συγκέντρωσης μπρεί να περιγραφεί με τις παρακάτω μαθηματικές σχέσεις:

0<x<2m	c=0
2<x<4m	c=(x-2)/2 [mg/l]
4<x<6m	c=(6-x)/2 [mg/l]
x>6m	c=0

Για τη επίλυση του παραπάνω προβλήματος προτείνονται τα εξής έξι (6) σενάρια τα οποία και παρουσιάζονται στον πίνακα 1:

<u>Πίνακας 1:</u> Προτεινόμενα δεδομένα διακριτοποίησης (υπολογίστε και εισαγάγετε στον πίνακα τον αριθμό Courant):

Σενάριο	Χρονικό βήμα Δt [s]	Απόσταση πλέγματος Δx [m]	Αριθμός Courant Cr=u Δt / Δx
1ο	0.5	1	
2ο	1	1	
3ο	1.0	.5	
4ο	.125	.25	
5ο	.0625	.125	
6ο	.5	.25	

<u>Ασκήσεις</u>

Α. Επίλυση του προβλήματος με πρόγραμμα Fortran

Δίνεται η δυνατότητα να συμπληρωθεί ένας κώδικας Fortran (advection.for).

1)Αποκρυπτογράφηση και τεκμηρίωση του κώδικα

Κάντε κατάλληλους πίνακες στους οποίους
Περιγράψτε τις μεταβλητές εισόδου
Περιγράψτε τις μεταβλητές εξόδου
Περιγράψτε τα αρχεία εισόδου
Περιγράψτε τα αρχεία εξόδου
Κάντε ένα οργανόγραμμα με όλες τις υπορουτίνες που υπεισέρχονται και περιγράψτε τις

Συμπληρώστε τις απαραίτητες εντολές
Ελέγξτε τον κώδικα για σφάλματα

2) Εκτέλεση κώδικα

Ποια (ο) από τα παραπάνω σενάρια αναμένεται να δώσει ακριβή αποτελέσματα;
Ποια (-ο) από τα παραπάνω σενάρια αναμένεται να παρουσιάσει (-ουν) προβλήματα;
Τι έχετε να παρατηρήσετε για την εφαρμογή της παραπάνω μεθόδου σε πρακτικές εφαρμογές;
Εξετάστε με την βοήθεια του κώδικα τα προτεινόμενα σενάρια. Αναλύστε τα αποτελέσματα με την βοήθεια γραφικών παραστάσεων

Εάν δεν συμπαθείτε την FORTRAN:

B. Επίλυση του προβλήματος με το Excel

Δημιουργείστε ένα αρχείο με όνομα *advectio.xls* στον φάκελο *numerics* στον σκληρό δίσκο και σε ένα υποφάκελο με το όνομα σας!

Χρησιμοποιείστε για κάθε σενάριο και ένα χωριστό υπολογιστικό φύλλο

ΓΡΑΜΜΕΣ

- Στην πρώτη γραμμή βάλτε τον χρόνο που αντιστοιχεί σε κάθε χρονικό βήμα (Αρχίστε από το τρίτο κελί)
- Στην δεύτερη τον αύξοντα αριθμό του χρονικού βήματος
- Χρησιμοποιείστε τις υπόλοιπες γραμμές για το πεδίο της συγκέντρωσης (βλέπε παρακάτω τον τρόπο υπολογισμού)

ΣΤΗΛΕΣ

Αρχίζοντας από την τρίτη γραμμή γράψτε :

- Στην πρώτη στήλη τον αύξοντα αριθμό των κελιών
- Στην δεύτερη στήλη τις χωρικές συντεταγμένες των κελιών
- Στην τρίτη στήλη το προφίλ της συγκέντρωσης στο χρονικό σημείο μηδέν (αρχικές συνθήκες)
- Χρησιμοποιείστε τις υπόλοιπες για τον υπολογισμό του πεδίου συγκέντρωσης στα διαδοχικά χρονικά βήματα.

Αφού κάνετε τα παραπάνω:

Δημιουργείστε μία γραφική παράσταση του προφίλ της συγκέντρωσης για χαρακτηριστικά χρονικά σημεία.

Σχολιάστε τα αποτελέσματα

2. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΕΞΙΣΩΣΗΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ

Θέλουμε να επιλύσουμε αριθμητικά την μονοδιάστατη εξίσωση διάχυσης:

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

Στην παραπάνω εξίσωση ο συντελεστής διάχυσης θεωρείται σταθερός, η επίλυση γίνεται σύμφωνα με την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, και σύμφωνα με τα ρητά αριθμητικά σχήματα

α) <u>FTCS. (Forward in Time Centered in Space),</u>

$$c_j^{n+1} = \gamma c_{j+1}^n + (1-2\gamma)c_j^n + \gamma c_{j-1}^n$$

β) <u>Leap Frog</u>

$$c_j^{n+1} = 2\gamma\left[c_{j+1}^n - 2c_j^n + c_{j-1}^n\right] + c_j^{n-1}$$

γ) <u>DuFort-Frankel</u>

$$c_{\mathrm{j}}^{\mathrm{n+1}} = 2\gamma\left[c_{j+1}^n - (c_j + c_j^{n-1}) + c_{j-1}^n\right] + c_j^{n-1}$$

βλέπε:Υπολογιστική Ρευστοδυναμική, Μαρκάτος και Ασημακόπουλος(1995), κεφάλαιο 4.

όπου σε όλα τα αριθμητικά σχήματα ισχύουν τα παρακάτω:

$\gamma = \dfrac{D\Delta t}{\Delta x^2}$ *ένας ισοδύναμος συντελεστής αριθμητικής διαχυτότητας*

Δt το χρονικό βήμα
Δx η αποστάσεις των σημείων του πλέγματος

Ο δείκτης αφορά την διακριτοποίηση στον χώρο (περιγραφή χωρικού σημείου)
Ο εκθέτης αναφέρεται στην χρονική διακριτοποίηση (χρονικό επίπεδο)

<u>Δεδομένα άσκησης</u>

Ο χώρος που εξετάζεται έχει μήκος *L=20m*, και συντελεστή διάχυσης *D*=1m^2/s. Θα κάνουμε τους υπολογισμούς για χρονική διάρκεια *t=20s*.

Οι αρχικές συνθήκες είναι $c = c_0$ για *t=0* για όλα τα x
Ενώ οι οριακές συνθήκες είναι οι εξής:

$c = c_I$,για x=0
$c = c_0$,για x=L

Πίνακας 1: Προτεινόμενα δεδομένα διακριτοποίησης:

Σενάριο	Χρονικό βήμα Δt [s]	Απόσταση πλέγματος Δx [m]	Συντελεστής αριθμητικής διαχυτότητας γ=D Δt / (Δx^2)
1ο	0.25	1	
2ο	1	1	
3ο	.125.0	.5	
4ο	2	1	
5ο	.1	.1.	

Θεωρείστε ότι $c_0 = 0$ και $c_I = 1$

Ασκήσεις

Α) Γράψτε ένα υπολογιστικό πρόγραμμα για την επίλυση του παραπάνω προβλήματος (κώδικας Fortranή υπολογιστικό φύλλο Excel)
Β) Επιλύστε τα παραπάνω σενάρια και με τα τρία σχήματα
Γ) Βρείτε κατάλληλο μέθοδο (μεθόδους) για να ελέγξετε την ακρίβεια των αποτελεσμάτων
Δ) Ποια «σχηματοποιημένα» προβλήματα αντιστοιχούν στο πρόβλημα που είδαμε

3. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΕΞΙΣΩΣΗΣ ΣΥΝΑΓΩΓΗΣ-ΔΙΑΣΠΟΡΑΣ

Θέλουμε να επιλύσουμε αριθμητικά την μονοδιάστατη εξίσωση συναγωγής:

$$\frac{\partial \mathrm{c}}{\partial \mathrm{t}} + u\frac{\partial c}{\partial x} = \mathrm{D}\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \tag{I}$$

Όπου *u* η ταχύτητα του μετώπου ρύπανσης και *D* ο συντελεστής διάχυσης.

Στην παραπάνω εξίσωση ο συντελεστής διάχυσης θεωρείται σταθερός, η επίλυση γίνεται σύμφωνα με την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, και σύμφωνα με το ρητό αριθμητικό σχήμα FTCS (*Forward in Time Centered in Space*), προκύπτει ότι:

$$c_{\mathrm{j}}^{\mathrm{n+1}} = c_j^n - \frac{Cr}{2}\left(c_{j+1}^n - c_{j-1}^n\right) + \gamma\left(c_{j+1}^n - 2c_j^n + c_{j-1}^n\right)$$

βλέπε:Υπολογιστική Ρευστοδυναμική, Μαρκάτος και Ασημακόπουλος (1995), κεφάλαιο 5.

Υπενθυμίζεται ότι ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις:

$Cr = \dfrac{u\Delta t}{\Delta x}$ *ο αριθμός Courant*

$\gamma = \dfrac{D\Delta t}{\Delta x^2}$ *ένας ισοδύναμος συντελεστής αριθμητικής διαχυτότητας*

Δt *το χρονικό βήμα*
Δx *η αποστάσεις των σημείων του πλέγματος*

Ο δείκτης αφορά την διακριτοποίηση στον χώρο (περιγραφή χωρικού σημείου)
Ο εκθέτης αναφέρεται στην χρονική διακριτοποίηση (χρονικό επίπεδο)

Το παραπάνω αριθμητικό σχήμα είναι ευσταθές όταν:

$Cr \leq 2\gamma \leq 1$

Άσκηση

Έστω υδροφορέας στον οποίον λαμβάνει χώρο μονοδιάστατη ροή κατά τον άξονα των x Το μήκος του υδροφορέα είναι *L=300m*. Για χρόνους $t < 0$ ο υδροφορέας δεν είχε υποστεί ρύπανση. Κατά το χρονικό σημείο t=0 παρουσιάζεται εισροή ρυπαντή στον υδροφορέα στο σημείο x=0. Για χρόνους $t \geq 0$, στο σημείο x=0 η τιμή της συγκέντρωσης είναι σταθερή (*c=1mg/l*). Το μέτωπο του ρυπαντή κινείται με σταθερή ταχύτητα *u=2m/d*. Μπορούμε να θεωρήσουμε ότι δεν λαμβάνουν χώρα χημικές αντιδράσεις και ότι ο ρυπαντής δεν προσροφάται / απορροφάται από τον στερεά φάση. Επίσης ότι η διεργασία είναι φικιανή, ο κυρίαρχος μηχανισμός διασποράς είναι σχετίζεται με τις ετερογένειες της διαπερατότητας, το φαινόμενο είναι μονοδιάστατο και ο συντελεστής διασποράς είναι ίσος με $D = 2{,}0 m^2 / d$.

Για το χρονικό σημείο *t=50d*, υπολογίστε την τιμή της συγκέντρωσης στα σημεία:

x=80m, x=90m, x=100m, x=110m, x=120m.

Λύστε την παραπάνω άσκηση με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών και το ρητό αριθμητικό σχήμα FTCS, επιλέγοντας χωρική και χρονική διακριτοποίηση της επιλογής σας. Χρησιμοποιείστε για τον σκοπό αυτό το πρόγραμμα Excel.

Πίνακας 1: Προτεινόμενος τρόπος οργάνωσης των εξεταζομένων σεναρίων:

Σενάριο	Χρονικό βήμα Δt	Απόσταση πλέγματος Δx [	Αριθμός Courant: *Cr=uΔt/Δx*	Συντελεστής αριθμητικής διαχυτότητας γ=D Δt / (Δx^2)
1ο				
2ο				
3ο				
4ο				
5ο				

l

Λύστε την ίδια άσκηση για την περίπτωση στιγμιαίας εισροής ρύπου

Έλεγχος

Ελέγξτε την αξιοπιστία της λύσης σας με την χρήση γνωστών αναλυτικών λύσεων

Ψάχνουμε την αναλυτική λύση για ένα πρόβλημα για το οποίο την στιγμή *t=0* έχουμε στην αρχή των συντεταγμένων άνοδο της συγκέντρωσης κατά $\bar{c}_0$ (εισαγωγή σκαλοπατιού). Εάν το μέσο μπορεί να θεωρηθεί ημιάπειρο, οι αρχικές συνθήκες μπορούν να γραφτούν *c=0* για *t<0*, οι οριακές συνθήκες μπορούν να γραφούν $c = \bar{c}_0$

για *x=0* και $t \geq 0$ ενώ για $x \rightarrow \infty$ ισχύει *c=0* για όλους τους χρόνους, για τα περισσότερα προβλήματα πρακτικού ενδιαφέροντος η λύση της (Ι) μπορεί να γραφεί:

$$\frac{\mathrm{c}}{\bar{\mathrm{c}}_0} \cong \frac{1}{2}\left\{erfc\left(\frac{x-ut}{2\sqrt{Dt}}\right)\right\}$$

όπου *erfc* η συμπληρωματική συνάρτηση λάθους (complementary error function):

$$erfc[x] = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x exp\left[-\omega^2\right]d\omega .$$

Βλέπε π.χ. την παράδοση της Υπόγειας Υδραυλικής.

Υπενθυμίζουμε επίσης ότι για την περίπτωση στιγμιαίας εισαγωγής ενός ρυπαντή σε έναν υδροφορέα στο χοονικό σημείο *t=0*, και μονοδιάστατου φαινόμενου η λύση της εξίσωσης συναγωγής-διασποράς γράφεται:

$$\mathrm{c}(\mathrm{x},\mathrm{t}) = \frac{\bar{c}_0}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{4Dt}\right]$$

όπου $\bar{c}_0$ είναι η συγκέντρωση του ρυπαντή στο χρονικό σημείο *t=0.*

4. ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ ΤΩΝ ΟΓΚΩΝ ΕΛΕΓΧΟΥ

Η μέθοδος των όγκων ελέγχου έχει σαν αρχή την ολοκλήρωση των εξεταζόμενων εξισώσεων σε έναν όγκο γύρω από κάθε σημείο του κανάβου στο οποίο η τιμή δεν γνωρίζουμε την τιμή της εξεταζόμενης μεταβλητής.

Διεθνώς έχουν καθιερωθεί οι εξής συμβάσεις:

Το σημείο γύρω από το οποίο πραγματοποιούμε την ολοκλήρωση ονομάζεται P (Point)

Το σημείο δυτικά του σημείου P ονομάζεται W (West)

Το σημείο ανατολικά του σημείου P ονομάζεται E (Est)

Το σημείο στο δυτικό σύνορο του όγκο ελέγχου του σημείου P ονομάζεται w

Το σημείο στο ανατολικό σύνορο του όγκο ελέγχου του σημείου P ονομάζεται e

Τα σημεία P, E, W είναι σημεία στα οποία «αποθηκεύουμε» τις τιμές του πεδίου συγκέντρωσης, ενώ τα σημεία w,e είναι βοηθητικά (τουλάχιστον ως προς την συγκέντρωση)

Θεωρώ την «μόνιμη» εξίσωση συναγωγής διασποράς

$$\frac{\partial(cu)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left((D\frac{\partial c}{\partial x}) \right)$$

Ολοκληρώνοντας σε έναν όγκο ελέγχου (εκτελέσω δηλαδή την πράξη $\int_w^e \cdot dx$)

προκύπτει ότι:

$$(cu)_e - (cu_w) = \left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right)_e - \left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right)_w$$

$$u_e c_e - u_w c_w = D_e\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_e - D_w\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_w$$

Τα μεγέθη της ταχύτητας και της διασποράς-διάχυσης θεωρούνται γνωστά, ενώ θέλω να εκφράσω τα μεγέθη που περιέχουν την συγκέντρωση συναρτήσει της συγκέντρωσης στα σημεία W,P,E.

Όσο αφορά την διακριτοποίηση των μεγεθών τα οποία σχετίζονται με την διάχυση διασπορά θεωρώ ότι οι παράγωγοι της συγκέντρωσης μπορούν εκφραστούν από τις σχέσεις:

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_w = \frac{c_P - c_w}{(\delta x)_w}, \qquad \left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_e = \frac{c_E - c_P}{(\delta x)_e}$$

θεωρώ δηλαδή ότι η κατανομή της συγκέντρωσης ανάμεσα σε δύο σημεία είναι γραμμική.γ Η φυσική ερμηνεία αυτής της παραδοχής είναι ότι ο νόμος του Fick θεωρεί την ροή της μάζας να εξαρτάται γραμμικά από την βαθμίδα της συγκέντρωσης

Για την προσομοίωση των όρων c_w, c_e οι οποίοι σχετίζονται με την διεργασία της μεταφοράς (ή συναγωγής), θεωρώ δυο περιπτώσεις, ανάλογα με την τιμή του «αριθμού Peclet κανάβου» ο οποίος ορίζεται ως $(Pe)_g = \frac{(u)\Delta x}{D}$

A) Για μικρές τιμές του $(Pe)_g$ το φαινόμενο κυριαρχείται από μηχανισμούς διάχυσης-διασποράς, άρα ΄θα θεωρήσουμε πάλι γραμμικό προφίλ συγκέντρωσης, κατά συνέπεια:

$$c_w = \frac{c_W + c_P}{2}, \; c_e = \frac{c_E + c_P}{2}$$

B) Για μεγάλες τιμές του $(Pe)_g$ το φαινόμενο κυριαρχείται από μηχανισμούς διάχυσης-διασποράς, άρα θα θεωρήσουμε ότι η συγκέντρωση σε ένα σημείο επηρρεάζεται κυρίως από την διασπορά «ανάντη», δηλαδή

$$c_w = \begin{cases} c_W & if\ u_w > 0 \\ c_P & if\ u_w < 0 \end{cases}, \qquad c_e = \begin{cases} c_E & if\ u_e < 0 \\ c_P & if\ u_e > 0 \end{cases}$$

Η παραπάνω μέθοδος γενικεύεται πολύ εύκολα και για το μη-μόνιμο φαινόμενο

αν τοποθετήσουμε τις παραπάνω σχέσεις σε ένα χρονικό επίπεδο ανάμεσα στο χρονικό επίπεδο n (παλιό χρονικό επίπεδο-συμβολίζεται συνήθως με τον εκθέτη 0) και στο χρονικό επίπεδο n+1 (νέο χρονικό επίπεδο συμβολίζεται συνήθως με τον εκθέτη 1), ολοκληρώσουμε ως προς τον χρόνο την εξίσωση

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial (cu)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left((D\frac{\partial c}{\partial x}) \right)$$

και χρησιμοποιήσουμε τις σχέσεις:

$$\int_{t}^{t+\Delta t} c \quad dt = \left[fc^1 + (1-f)c^0 \right] \Delta t$$

όπου f είναι ένας συντελεστής βάρους $0 \le f \le 1$

και

$$\int_{w}^{e} \int_{t}^{t+\Delta t} \frac{\partial c}{\partial t} dt = \Delta x \left[c^1 - c^0 \right]$$

όπου Δx είναι το «πλάτος» του όγκου ελέγχου

Προφανώς το σχήμα είναι ρητό μόνο για $f = 0$.

Σε αντίθετη περίπτωση παίρνω μία εξίσωση για κάθε κόμβο στον οποίο η τιμή της συγκέντρωσης είναι άγνωστη, και προκύπτει ένα γραμμικό σύστημα εξισώσεων.

5. ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ RANDOM WALK

Η μεταφοράς μάζας περιγράφεται από σωματίδια τα οποία κινούνται σε ένα πεδίο ροής.

Κάθε σωματίδιο έχει και μία ορισμένη μάζα: Στην κλασσική μορφή της μεθόδου αυτής υπάρχουν σωματίδια μόνο στις περιοχές που όντως υπάρχει ρύπανση.
Η μέθοδος αυτή αν και δεν απαιτεί την επίλυση διαφορικών εξισώσεων, προϋποθέτει την διακριτοποίηση της εξεταζόμενης περιοχής με την βοήθεια «ορθογωνικού» κανάβου.

Η συγκέντρωση σε κάθε χρονικό σημείο και κάθε «κελί» , υπολογίζεται ως εξής

- Έχουμε υπολογίσει τον συνολικό αριθμό σωματιδίων σε κάθε κελί για το συγκεκριμένο χρονικό βήμα
- Υπολογίζουμε στην συνέχεια τη μάζα του ρυπαντή στο συγκεκριμένο κελί, γνωρίζοντας τη «στοιχειώδη μάζα» κάθε σωματιδίου
- Ο όγκος το κάθε κελιού όντας γνωστός πριν από την έναρξη των υπολογισμών, το πεδίο συγκέντρωσης υπολογίζεται πολύ εύκολα.

Οι «εναρκτήριες» θέσεις των σωματιδίων υπολογίζονται από τις αρχικές συνθήκες της συγκέντρωσης.

Για να υπολογιστούν οι θέσεις των σωματιδίων στα επόμενα χρονικά βήματα, συνδέουμε την κίνηση των σωματιδίων με «κανόνες μετακίνησης»: η μεταφορά από το πεδίο ροής προσεγγίζεται σαν μία ντετερμινιστική διεργασία, ενώ το «άπλωμα» του μετώπου σαν μία στοχαστική διεργασία.

Μία κατανόηση του αλγορίθμου επίλυσης επιτρέπει η αναλυτική λύση του μονοδιάστατου φαινομένου της εξάπλωσης ρύπου σε ομοιόμορφο πεδίο ροής.

Αν υποθέσουμε ότι υπάρχει «στιγμιαία» και «σημειακή» διάθεση ρύπου στο σημείο *x=0* στον χρόνο *t=0*, με αρχική συγκέντρωση c_0 συγκέντρωση δίνεται από την εξίσωση:

$$c(x,t) = \frac{c_0}{\sqrt{4\pi D_L t}} exp\left[-\frac{(x-ut)}{4D_L t}\right]$$

Η δομή της παραπάνω συνάρτησης είναι ταυτόσημη με την δομή της «κανονικής κατανομής» ως προς τον άξονα *x,* με μέση τιμή $\bar{x} = ut$

και τυπική απόκλιση $\sigma = \sqrt{2D_L t}$

Κατά αναλογία η απόσταση την οποία διανύει ένα σωματίδιο σε ένα χρονικό σημείο με μέγεθος βήματος Δt είναι:

$$(\delta x)_p = u_p(\Delta t) + Z\sqrt{2D_L(\Delta t)}$$

όπου Z είναι μία στοχαστική συνάρτηση, η οποία υπόκειται σε κανονική κατανομή, με μέσο όρο 0 και τυπική απόκλιση 1.

Γνωρίζοντας την θέση του σωματιδίου στο χρονικό σημείο t, η θέση του σωματιδίου στο χρονικό σημείο $t + \Delta t$ υπολογίζεται σε:

$$x_p(t + \Delta t) = x_p(t) + u_p \Delta t + Z\sqrt{2 D_L \Delta t}$$

Στην πράξη η στοχαστική συνάρτηση Z μπορεί να υπολογιστεί από την σχέση:

$$Z = -6 + \sum_{i=1}^{12} X_i$$

όπου X_i μία στοχαστική συνάρτηση με ομοιόμορφη τιμή η οποία παίρνει τιμές στο διάστημα [0,1].

Τέτοιες συναρτήσεις είναι ενσωματωμένες στις περισσότερες γλώσσες προγραμματισμού