

## NUMERICKÁ SIMULACE TRANSPORTNÍCH PROCESŮ CHEMICKÝCH LÁTEK V PŮDĚ

JIŘÍ ŠIMŮNEK

V článku je popsán model SWMI-ST určený k analýze jednorozměrného proudění vody a transportu rozpuštěných látek v nenasyčeném i nasyceném pórovitém prostředí. V transportní rovnici jsou zahrnuty procesy molekulární difúze, mechanické disperze, adsorpce a produkční a rozkladové procesy prvního a nultého řádu. Je popsána technika výpočtu trajektorií proudících částic, umožňující modelovat pohyb inertních látek nepodléhajících disperzi. Použití modelu je demonstrováno na sezónní simulaci proudění vody a zasolovacího procesu v oblasti Hurbanovo.

**KLÍČOVÁ SLOVA:** numerická simulace, přenos rozpuštěných látek, křivky rozdělení.

Jiří Šimůnek: Numerical Simulation of the Transport Processes in Soil. *Vodohosp. Čas.*, 38, 1990, 6; 16 refs, 8 figs, 2 tabs.

The model SWMI-ST designated to analyse the one-dimensional water movement and solute transport in partially saturated porous media is described. In transport equation the molecular diffusion, mechanical dispersion, adsorption and source and decay processes are included. The technique to calculate the time depth curves is proposed to model the transport of inert chemical materials not subjected to dispersion. The model is used to calculate two variants of seasonal simulation of water movement and salinization proces in Southern Slovakia.

**KEY WORDS:** Numerical Simulation, Solute Transport, Time-Depth-Curves.

Иржи Шимунек: Нумерическая симуляция транспортных процессов химических веществ в почве. *Vodohosp. Čas.*, 39, 1991, 1; 16 лит., 8 рис., 2 табл.

В статье описан модел SWMI-ST, с помощью которого можно анализировать одномерное движение воды и растворных веществ в насыщенной или ненасыщенной пористой среде. В транспортном уравнении заключены явления молекулярной диффузии, механической дисперсии, ионных обменов и производственные и замедленные процессы первой и второй степени. Также описана техника вычисления траекторий частиц, позволяющая моделировать движение

Ing. Jiří Šimůnek, Výzkumný ústav pro zúrodnování zemědělských půd, Bažantní 697, 160 00 Praha 6.

инертных веществ без дисперсии. Применение модели показано на сезонной симуляции движения воды и химических веществ в области Гурбаново.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** численная симуляция, перенос растворенных веществ, кривые распределения.

### Úvod

Pohyb rozpuštěných látek nenasyčeným prostředím má velký význam pro dnešní zemědělství. Voda vstupující do půdního profilu v důsledku infiltrace ze srážek, závlah nebo vztlínáním z hladiny podzemní vody obsahuje vždy určité koncentrace rozpuštěných solí. Srážky jsou znečištěné následkem průmyslových exhalací a emisí. Podzemní voda, resp. říční voda použitá k závlahám, obyčejně obsahuje kromě znečišťujících látek v důsledku antropologické činnosti též zvýšené koncentrace solí přírodního původu rozpuštěných z geologického materiálu, s kterým byla voda v kontaktu. Dochází k nebezpečí, že všechny tyto látky se mohou akumulovat v půdním profilu, neboť v průběhu výparu, kdy se voda vypařuje z půdního povrchu, veškeré soli zde zůstávají. Také rostliny odebírají vodu selektivně, vylučující prakticky veškeré soli [11].

Pokud dojde k akumulaci solí v kořenové zóně, může dojít k redukci výnosů limitováním transpirace nebo zničením rostlinné tkáně. Vysoký obsah sodíku může zničit půdní strukturu, a tak snížit propustnost půdy pro vodu i kořeny.

Správné řízení vlhkostního režimu půd vyžaduje porozumění pohybu půdního roztoku při podmínkách nenasyčeného proudění. Vhodné použití hnojiv, pesticidů a jiných chemikálií vyžaduje znalost jejich pohybu poté, co se stanou součástí půdního roztoku. Také aplikace různých odpadů do půdy může být provedena s minimální možností kontaminace podzemní vody, pokud pohyb rozpuštěných látek při perkolaci do hlubších horizontů může být přesně předpovězen [12].

Matematický model pro předpověď pohybu vody a rozpuštěných látek nenasyčeným pórovitým prostředím je základním nástrojem pro řešení těchto problémů. Numerický simulační model jednorozměrného transportu rozpuštěných látek v pórovitém prostředí založený na řešení Richardsovy a konvektivně disperzní rovnice byl předložen v článku Šimůnka a Semotána [13]. V tomto článku je popsána jeho rozšířená verze, zahrnující též modelování odběru vody kořeny rostlin a pohybu proudících částic. Výpočet trajektorií částic a řešení konvektivně disperzní rovnice představují navzájem zcela nezávislé přístupy k problematice transportu rozpuštěných látek. Pro oba přístupy je společná pouze nutná znalost vývoje tlakového a vlhkostního pole v čase, a tudíž předcházející řešení Richardsovy rovnice. Použití obou přístupů modelu je demonstrováno na numerické simulaci sezónních transportních procesů.

## Matematický model

### Rovnice proudění

Jednorozměrné proudění vody v částečně nasyceném pórovitém prostředí je možno popsat modifikovanou Richardsovou rovnicí:

$$C(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ K(h) \left[ \frac{\partial h}{\partial x} + \cos \alpha \right] \right\} - S(h), \quad (1)$$

kde  $h$  je tlaková výška [L],  $K$  — hydraulická vodivost [L/T],  $C$  — specifická vodní kapacita [L<sup>-1</sup>],  $S$  — propadový (extrakční) člen [T<sup>-1</sup>],  $x$  — prostorová souřadnice [L],  $\alpha$  — úhel odklonění osy proudění od osy orientované svisle vzhůru [°],  $t$  — čas [T]. Jednotlivé členy a parametry rovnice proudění a okrajové a počáteční podmínky jsou podrobně diskutovány v lit. Vogel [14, 15, 16].

### Transportní rovnice

Transport rozpuštěných látek při jednorozměrném izotermním darcyovském proudění vody v částečně nasyceném pevném pórovitém prostředí je popsán transportní rovnicí:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Theta c + \varrho s) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Theta D \frac{\partial c}{\partial x} - v c \right) - \mu_w \Theta c - \mu_s \varrho s + \gamma_w \Theta + \gamma_s \varrho, \quad (2)$$

kde  $c$  je koncentrace rozpuštěné látky [ML<sup>-3</sup>],  $\Theta$  — vlhkost [—],  $\varrho$  — objemová hmotnost porézního prostředí [ML<sup>-3</sup>],  $v$  — objemová rychlost proudění vody [LT<sup>-1</sup>],  $D$  — disperzní koeficient [L<sup>2</sup>T<sup>-1</sup>],  $x$  — prostorová souřadnice [L] a  $t$  je čas [T]. Nekonzervativnost proudění rozpuštěné látky je popsána pomocí rychlostních konstant prvního řádu  $\mu_w$  [T<sup>-1</sup>] a  $\mu_s$  [T<sup>-1</sup>] pro propad v kapalně, resp. pevné fázi, rychlostních konstant nultého řádu  $\gamma_w$  [ML<sup>-3</sup>T<sup>-1</sup>] a  $\gamma_s$  [T<sup>-1</sup>] pro zdroj v kapalně, resp. pevné fázi a pomocí adsorbované koncentrace  $s$  [—]. Objemová rychlost je vyjádřena pomocí Darcyho zákona:

$$v = -K(h) \frac{\partial h}{\partial x} - K(h). \quad (3)$$

Disperzní koeficient reprezentuje účinky molekulární difúze a mechanické disperze. Disperzní koeficient je definován:

$$D = D_m \tau + \lambda |v/\Theta|, \quad (4)$$

kde  $D_m$  je koeficient molekulární difúze [L<sup>2</sup>T<sup>-1</sup>],  $\tau$  — faktor tortuozity [—] a  $\lambda$  je

disperzivita [L]. Adsorpční koncentrace je vztažena ke koncentraci roztoku pomocí lineární adsorpční izotermy:

$$s = kc, \quad (5)$$

kde  $k$  [L<sup>3</sup>M<sup>-1</sup>] je empirická konstanta (sklon adsorpční izotermy). Zavedením retardačního faktoru  $R$  [—]

$$R = 1 + \frac{\varrho k}{\Theta} \quad (6)$$

a výrazu (5) do rovnice (2) získáme výchozí rovnici pro numerické řešení.

$$\frac{\partial (\Theta R c)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Theta D \frac{\partial c}{\partial x} - v c \right) - (\mu_w \Theta + \mu_s \varrho k) c + \gamma_w \Theta + \gamma_s \varrho. \quad (7)$$

V rov. (7) není uvažován odběr chemických látek kořeny v návaznosti na extrační člen  $S$  (rovnice (1)), tzn. je uvažován selektivní odběr vody prostřednictvím kořenů.

### Počáteční podmínky

Pro řešení rovnice (7) je nezbytná znalost počátečního stavu, tj. počátečního koncentračního pole nad celou řešenou oblastí:

$$c(x, 0) = c_i(x), \quad (8)$$

kde  $c_i$  je předepsaná funkce  $x$ .

### Okrajové podmínky

Na obou okrajích je možné použít Dirichletovu okrajovou podmínku

$$c(x, t) = c_o(t), \quad (9)$$

kde  $c_o$  je koncentrace rozpuštěné látky v infiltrující kapalině, resp. podzemní vodě, nebo podmínku Cauchyovu

$$-\Theta D \frac{\partial c}{\partial x} + v c = v_o c_o, \quad (10a)$$

$$-\Theta D \frac{\partial c}{\partial x} + v c = 0, \quad (10b)$$

kde  $v_o$  je rychlost na povrchu ( $x = b$ ), resp. ve dně půdního profilu ( $x = a$ ).

Nulová Newtonova okrajová podmínka se zavádí na povrchu půdního profilu v případě, že  $v_0 \geq 0$ , tj. v období výparu nebo redistribuce. Na dolním okraji je možné pro případ volné drenáže použít podmínku:

$$\frac{\partial c}{\partial x} = 0. \quad (11)$$

### Numerické řešení transportní rovnice

K řešení rov. (7) vzhledem k okrajovým a počátečním podmínkám je užito Galerkinovy varianty metody konečných elementů. Protože užití této metody pro řešení transportní rovnice je podrobně popsáno jinde (např. Huyakorn et al. [8], van Genuchten [5, 7]), jsou na tomto místě rekapitulovány jenom základní předpoklady a výsledky aproximačního procesu.

Aplikací Galerkinovy metody se obdrží systém časově závislých obyčejných diferenciálních rovnic, který v maticové formě má tvar:

$$[Q] \left\{ \frac{dc}{dt} \right\} + [S] \{c\} = \{f\}. \quad (12)$$

Numerického řešení prostorově diskretizované transportní rovnice (12) získáme nahrazením spojité časové souřadnice diskrétní posloupností časových okamžiků a záměnou časových derivací za konečné diference. Časové diferenční schéma je možné volit na vstupu parametrem  $\varepsilon$  ( $= 0$ : explicitní schéma,  $= 0,5$ ; Crank-Nicholsonovo schéma,  $= 1$ : plně implicitní schéma).

$$\frac{1}{\Delta t} ([Q]^{k+1} \{c\}^{k+1} - [Q]^k \{c\}^k + \varepsilon [S]^{k+1} \{c\}^{k+1} + (1 - \varepsilon) [S]^k \{c\}^k + \varepsilon \{f\}^{k+1} + (1 - \varepsilon) \{f\}^k) = 0, \quad (13)$$

kde  $k$  a  $k + 1$  označují minulou a současnou časovou úroveň a  $\Delta t$  časový interval.

Aproximace vyššího řádu časové derivace je dosaženo zavedením opravných faktorů odvozených van Genuchtenem [4] do výpočtu disperzního koeficientu:

$$D^- = D - \frac{v^2 \Delta t}{6\Theta^2 R}, \quad (14a)$$

$$D^+ = D + \frac{v^2 \Delta t}{6\Theta^2 R}. \quad (14b)$$

Strategie řešení je popsána ve studii [13].

### Výpočet trajektorií proudících částic

V případě výskytu vysokých koncentračních gradientů a vysokých hodnot Pecletova čísla dochází k numerické disperzi a případně k numerické nestabilitě řešení. V takovém případě je možné transport chemické látky modelovat pomocí výpočtu trajektorií částic.

Východiskem pro výpočet trajektorií proudících částic je několik základních principů (Duinisveld [3], Boekhold [1]). Jelikož se jedná o jednorozměrné proudění, částice se pohybují půdním profilem pouze ve vertikálním směru. Obsah vody v půdním profilu je ovlivněn čtyřmi procesy — aktuální infiltrací, aktuálním výparem, aktuální transpirací a odtokem, resp. přítokem ve dně půdního profilu. Vývoj tlakového, resp. vlhkostního pole je plně popsán řešením Richardsovy rovnice (1). Vlastní výpočet pohybu vodních částic je založen na následující teorii pohybu vody v půdě.

První sledovaná částice pod půdním povrchem se v čase  $t = t_0$  nachází v hloubce  $x = x_0$ . Mezi touto částicí a povrchem půdy je množství vody  $W_0$  [L]:

$$W_0 = \int_{x_0}^h \Theta(x, t_0) dx. \quad (15)$$

Během časového intervalu  $(t_0, t_1)$  projde povrchem půdy množství vody  $N$  [L]:

$$N = \int_{t_0}^{t_1} [E_a(t) - I_a(t)] dt, \quad (16)$$

kde  $E_a(t)$  [ $LT^{-1}$ ] je aktuální výpar a  $I_a(t)$  [ $LT^{-1}$ ] je skutečná infiltrace ze srážky nebo závlahy. Během téhož intervalu je vrstva mezi půdním povrchem a sledovanou částicí ochuzena kořenovou zónou extrakcí o transpirované množství  $S$  [L]:

$$S = \int_{t_0}^{t_1} \int_{x(t)}^h S(x, t) dx dt, \quad (17)$$

kde  $S(x, t)$  je propadový (extrakční) člen [ $T^{-1}$ ]. V čase  $t_1$  se tedy mezi povrchem půdy a sledovanou částicí nachází množství vody  $W_1$  [L]:

$$W_1 = W_0 - N - S, \quad (18)$$

tzn. sledovaná částice se nachází v hloubce  $x = x_1$ .

$$\int_{x_1}^h \Theta(x, t_1) dx = \int_{x_0}^h \Theta(x, t_0) dx - \int_{t_0}^{t_1} [E_a(t) - I_a(t)] dt - \int_{t_0}^{t_1} \int_{x(t)}^h S(x, t) dx dt. \quad (19)$$

Opakovaným řešením rovnice (19) pro časovou posloupnost  $(t_0, t_1, \dots, t_n)$  získáme posloupnost hloubek  $(x_0, x_1, \dots, x_n)$ , tj. získáme trajektorii sledované částice.

Výpočet druhé a dalších částic je možné provést analogickým způsobem. Nyní se ovšem bilancuje množství vody mezi dvěma následujícími částicemi. Mezi těmito částicemi je v čase  $t_0$ , resp.  $t_1$  množství vody  $W_0$ , resp.  $W_1$ .

$$W_0 = \int_{x_0(t_0)}^{x_0(t_0)} \Theta(x, t_0) dx, \quad W_1 = \int_{x_0(t_1)}^{x_0(t_1)} \Theta(x, t_1) dx. \quad (20)$$

Během časového intervalu  $(t_0, t_1)$  je množství vody mezi oběma částicemi ochuzeno o transpirační množství  $S$ :

$$S = \int_{t_0}^{t_1} \int_{x_0(t)}^{x_0(t)} S(x, t) dx dt. \quad (21)$$

Výsledná rovnice má nyní tvar:

$$\int_{x_0(t_1)}^{x_0(t_1)} \Theta(x, t_1) dx = \int_{x_0(t_0)}^{x_0(t_0)} \Theta(x, t_0) dx - \int_{t_0}^{t_1} \int_{x_0(t)}^{x_0(t)} S(x, t) dx dt. \quad (22)$$

Vlastní algoritmus probíhá následujícím způsobem: Ze známé polohy částic na počátku časového intervalu, předem vyřešeného vývoje vlhkostního profilu a skutečných hodnot infiltrace, výparu a transpirace se pomocí rov. (19) vypočte nová poloha první sledované částice. Pomocí rov. (22) se poté vypočtou nové polohy všech ostatních částic. Na povrchu, resp. ve dně půdního profilu mohou vznikat, resp. půdní profil opouštět, nové částice v závislosti na aktuálním vývoji vlhkosti v profilu.

Pomocí výpočtu trajektorií proudících částic lze modelovat pohyb inertních látek nepodléhajících disperzi. Průměrnou koncentraci v jednotlivých oblastech mezi dvěma následujícími částicemi lze snadno určit z počáteční koncentrace (předem zadané k jednotlivým oblastem) a z úbytku vody v těchto vrstvách vlivem extrakčního členu  $S$ .

### Sezónní simulace transportních procesů

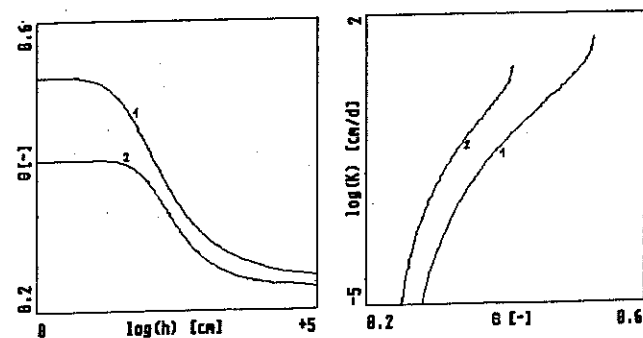
Použití numerického modelu SWMI-ST je dokumentováno na dvou variantách sezónní simulace vodního režimu a zasolovacího procesu v oblasti Hurbanova, kde se očekává zvýšené nebezpečí zasolení povrchové vrstvy v důsledku předpokládaného zvýšení hladin podzemní vody vlivem výstavby vodních děl na Dunaji (Kutílek [9]).

Schematický půdní profil tvoří homogenní materiál, ve kterém se 45 cm pod půdním povrchem nachází 15 cm vrstva tzv. atky s velmi sníženou hydraulickou vodivostí. Hodnoty retenční křivky  $h(\Theta)$  a nasycené hydraulické vodivosti obou vrstev byly měřeny přímo (Burger, [2]) zatímco nenasyčená hydraulická vodivost byla předpovězena pomocí Mualemova predikčního modelu [10]. Parametry hydraulických funkcí (tab. 1) byly získány proložení analytického výrazu van Genuchtena [6] experimentálními body. Hydraulické charakteristiky jsou vykresleny na obr. 1. Koefficient molekulární difúze je uvažován hodnotou  $4 \text{ cm}^2 \text{ d}^{-1}$  a disperzivita hodnotou 1 cm.

Tabulka 1. Parametry půdních hydraulických charakteristik (Burger [2]).  
Table 1. Parameters of soil hydraulic properties (Burger [2]).

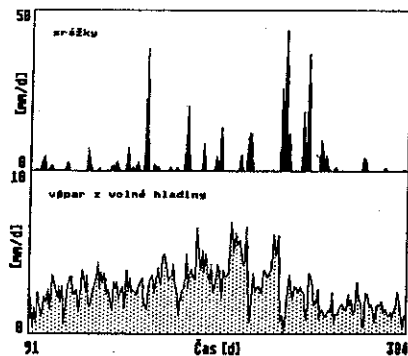
Parametr	1. vrstva	2. vrstva (atka)
$\Theta_s$ [—]	0,525	0,408
$\Theta_r$ [—]	0,240	0,229
$K_s$ [ $\text{cm d}^{-1}$ ]	24,8	5,4
$\alpha$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]	0,0182	0,0075
$n$ [—]	1,515	1,722
$m$ [—]	0,340	0,419

Hladina podzemní vody je uvažována konstantní v průběhu simulace v hloubce 140 cm pod povrchem a koncentrace rozpuštěných solí v podzemní vodě je konstantní (3000 mg/l). Za počáteční podmínku byl vzat vlhkostní profil odpovídající rovnovážnému stavu a konstantní koncentrace půdního roztoku (2000 mg/l). Na horním okraji je předepsán průběh srážkové intenzity a poten-



Obr. 1. Hydraulické charakteristiky půdního prostředí (2 — atka), (Burger [2]) — a) retenční křivka  $h(\Theta)$ , b) hydraulická vodivost  $k(h)$ .  
Fig. 1. Hydraulic characteristics; a) retention curve  $h(\Theta)$ , b) hydraulic conductivity  $k(h)$ .

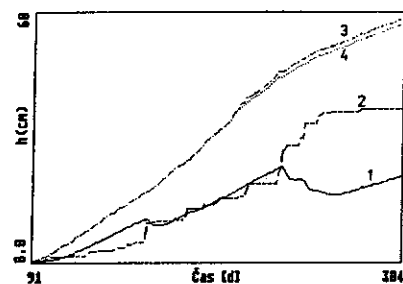
ciální evapotranspirace (obr. 2), která byla ztotožněna s hodnotou výparu z volné hladiny. Veškerá atmosferická data jsou do modelu zavedena v denních úhrnech. Výpočet je proveden ve dvou variantách pro vegetační sezónu 1988. V první variantě byl předpokládán holý povrch půdy, kdy potenciální výpar se rovnal potenciální evapotranspiraci. V druhé variantě byl půdní povrch zcela zastíněn vegetací s podmínkou, že potenciální evapotranspirace se rovná transpiraci. Jedná se tedy o dvě extrémní možnosti zadání okrajové podmínky.



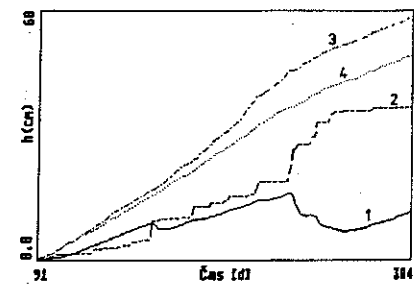
Obr. 2. Průběh srážek a výparu z volné hladiny ve vegetační sezóně 1988 (převzato ze SMS).  
Fig. 2. Actual precipitation and potential evapotranspiration for the season 1988.

Výsledky výpočtu jsou názorně vykresleny na obr. 3—8. Obr. 3 a 4 a tab. 2 přináší kumulativní bilanční veličiny pro obě varianty — kumulativní skutečný výpar a transpiraci, kumulativní potenciální evapotranspiraci, kumulativní tok dnem půdního profilu a kumulativní srážky a skutečnou infiltraci. Zatímco v případě druhé varianty došlo k redukci srážek na skutečnou infiltraci o 1,8 cm, při první variantě redukce srážek nenastala. Při uvažování povrchu půdy nezastíněného vegetací došlo ke značnému poklesu toku od hladiny podzemní vody směrem vzhůru. Toto snížení bylo způsobeno velkou redukcí potenciálního výparu z půdního povrchu na výpar skutečný. V případě plně zastíněného povrchu s nulovým výparem, kdy veškerý odběr vody se děje pouze prostřednictvím kořenů rostlin, došlo k podstatně nižšímu rozdílu mezi hodnotami potenciálními a skutečnými. Příčinou menší redukce při druhé variantě je skutečnost, že odběr vody z půdního profilu je — na rozdíl od varianty první — rozložen na větší část profilu (celá kořenová zóna).

Na obr. 5 a 6 jsou vykresleny trajektorie proudících částic pro obě uvažované varianty. Počáteční poloha částic byla určena tak, že první částice se nachází přímo na povrchu půdního profilu a ostatní částice jsou od sebe navzájem vzdáleny o 5 cm kumulativní objemové vlhkosti. To znamená, že absolutní

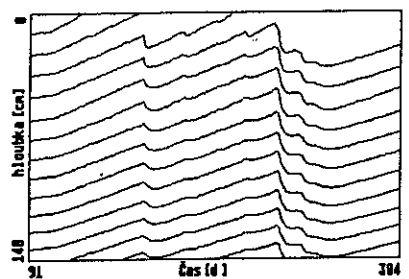


Obr. 3. Sezónní bilance — varianta 1 (holý povrch); 1 — kumulativní tok dnem, 2 — kumulativní infiltrace, 3 — kumulativní potenciální evapotranspirace, 4 — kumulativní skutečná transpirace.

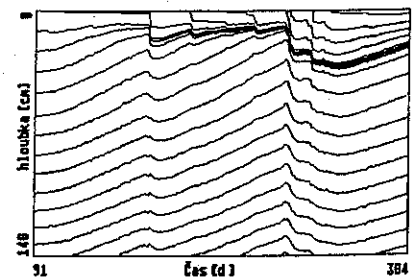


Obr. 4. Sezónní bilance — varianta 2 (porostlý povrch); 1 — kumulativní tok dnem, 2 — kumulativní infiltrace, 3 — kumulativní potenciální evapotranspirace, 4 — kumulativní skutečný výpar.

Fig. 3. Seasonal balance — variant 1; 1 — cumulative flux through bottom, 2 — cumulative infiltration, 3 — cumulative potential evapotranspiration, 4 — cumulative actual transpiration.  
Fig. 4. Seasonal balance — variant 2; 1 — cumulative flux through bottom, 2 — cumulative infiltration, 3 — cumulative potential evapotranspiration, 4 — cumulative actual transpiration.

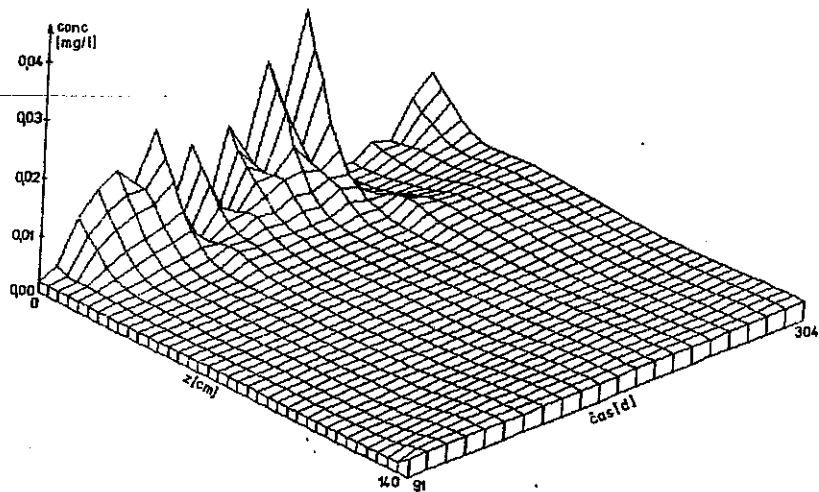


Obr. 5. Trajektorie proudících částic — varianta 1 (holý povrch).  
Fig. 5. Time depth curves — variant 1.

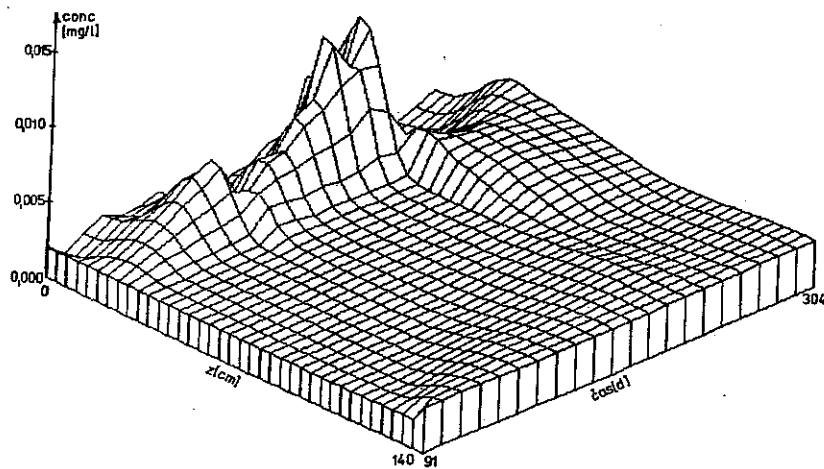


Obr. 6. Trajektorie proudících částic — varianta 2 (porostlý povrch).  
Fig. 6. Time depth curves — variant 2.

vzdálenost mezi částicemi je závislá na vlhkosti; je nižší v oblastech o vyšších vlhkostech a nižší v oblastech s nižší objemovou vlhkostí. Na hranicích půdního profilu vznikají nové částice po kumulativním průtoku rovnajícím se opět 5 cm. Zatímco při první variantě zůstává relativní vzdálenost (5 cm vodního sloupce)



Obr. 7. Průběh koncentrace v půdním profilu — varianta 1 (holý povrch).  
Fig. 7. Concentration profiles — variant 1.



Obr. 8. Průběh koncentrace v půdním profilu — varianta 2 (porostlý povrch).  
Fig. 8. Concentration profiles — variant 2.

Tabulka 2. Kumulativní bilanční veličiny v cm; cPrec — kumulativní srážky, cInf — kumulativní infiltrace, cpET — kumulativní potenciální evapotranspirace, cTrans — kumulativní skutečná transpirace, cEvap — kumulativní skutečný výpar, cvBot — kumulativní tok dnem (+ směrem vzhůru).

Table 2. Cumulative balance values [cm]; cPrec — cumulative precipitation, cInf — cumulative infiltration, cpET — cumulative potential evapotranspiration, cTrans — cumulative actual transpiration, cEvap — cumulative actual evaporation, cvBot — cumulative flux through the bottom (positive upwards).

	Varianta 1	Varianta 2
cPrec	36,6	36,6
cInf	36,6	34,8
cpET	58,1	58,1
cTrans	—	57,1
cEvap	49,1	—
cvBot	11,1	19,6

mezi částicemi zachována, při druhé variantě se tato vzdálenost v oblasti kořenové zóny zmenšuje vlivem odběru vody kořeny rostlin. V případě selektivního odběru vody kořeny rostlin v této oblasti výrazně vzrůstá koncentrace chemických látek. Z tohoto důvodu je výpočet trajektorií proudících částic velmi ilustrativním nástrojem pro odhalení oblastí s vyššími koncentracemi bez nutnosti řešit konvektivně disperzní rovnici (7).

Na obr. 7 a 8 je znázorněn průběh koncentrace v půdním profilu v období celé vegetační sezóny získaný na základě numerického řešení konvektivně disperzní rov. (7) pro obě varianty. V případě první varianty (holý povrch) se koncentrace solí v mimosrážkovém období výrazně zvyšuje na půdním povrchu. V období srážek nastává jejich posun zpět do půdního profilu. V povrchové vrstvě dochází ke značné fluktuaci koncentrace solí vlivem meteorologických faktorů v průběhu celé vegetační sezóny. V případě druhé varianty (porostlý povrch) se koncentrační extrém nenachází na povrchu, ale v oblasti kořenové zóny 15 až 30 cm pod povrchem půdního profilu. Koncentrační extrém nedosahuje hodnot koncentračního extrému varianty první v důsledku rozložení odběru vody na větší část půdního profilu. Avšak průměrná koncentrace v horní vrstvě je vyšší v druhé variantě v důsledku většího celkového toku od hladiny podzemní vody, a tudíž i vyšší akumulace solí v povrchové vrstvě.

### Závěr

V článku byl popsán model SWMI-ST určený k analýze jednorozměrného proudění vody a transportu rozpuštěných látek v nenasyčeném i nasyceném pórovitém prostředí. V transportní rovnici jsou zahrnuty procesy molekulární

difúze a mechanické disperze pomocí disperzního koeficientu. Adsorpce je vyjádřena pomocí lineární adsorpční izotermy, tzn. je chápána jako okamžitý reverzibilní proces. Radioaktivní rozpad, srážení, extrakce chemických látek kořenovým systémem atd. je možné modelovat prostřednictvím produkčních a rozkladových procesů prvního a nultého řádu. Byl stručně popsán algoritmus výpočtu trajektorií proudících částic, umožňující modelovat pohyb inertních látek nepodléhajících disperzi, kdy se řídící parabolická parciálně diferenciální transportní rov. (7) redukuje na rovnici hyperbolickou. Použití modelu bylo demonstrováno na dvou variantách sezónní simulace proudění vody a zasolovacího procesu v oblasti Hurbanovo.

#### Seznam symbolů

$c$	— koncentrace [ML <sup>-3</sup> ],
$C$	— hydraulická kapacita [L <sup>-1</sup> ],
$D$	— disperzní koeficient [L <sup>2</sup> T <sup>-1</sup> ],
$D_m$	— koeficient molekulární difúze [L <sup>2</sup> T <sup>-1</sup> ],
$E_n$	— aktuální výpar [LT <sup>-1</sup> ],
$h$	— tlaková výška [L],
$I_p$	— skutečná infiltrace [LT <sup>-1</sup> ],
$k$	— distribuční koeficient pro lineární adsorpci [L <sup>3</sup> M <sup>-1</sup> ],
$K$	— hydraulická vodivost [LT <sup>-1</sup> ],
$K_s$	— nasycená hydraulická vodivost [LT <sup>-1</sup> ],
$n, m, \alpha$	— parametry retenční křivky [—], [—], [L <sup>-1</sup> ],
$R$	— retardační faktor [—],
$s$	— adsorpční koncentrace [—],
$S$	— propadový (extrakční) člen [T <sup>-1</sup> ],
$t$	— čas [T],
$v$	— Darcyovská rychlost [LT <sup>-1</sup> ],
$x$	— souřadnice [L],
$\Phi_n$	— lineární bázové funkce [—],
$\delta_{mn}$	— Kroneckerovo delta [—],
$\gamma_n$	— rychlostní konstanta nultého řádu pro zdroj v kapalně fázi [ML <sup>-3</sup> T <sup>-1</sup> ],
$\gamma_s$	— rychlostní konstanta nultého řádu pro zdroj v pevně fázi [T <sup>-1</sup> ],
$\mu_n$	— rychlostní konstanta prvního řádu pro propad v kapalně fázi [T <sup>-1</sup> ],
$\mu_s$	— rychlostní konstanta prvního řádu pro propad v pevně fázi [T <sup>-1</sup> ],
$\lambda$	— disperzivita [L],
$\rho$	— objemová hmotnost [ML <sup>-3</sup> ],
$\tau$	— tortuozita [—],
$\Theta$	— objemová vlhkost [—],
$\Theta_r$	— residuální objemová vlhkost [—],
$\Theta_s$	— nasycená objemová vlhkost [—].

#### LITERATÚRA

- [1] BOEKHOLD, A. E.: Waterbeweging en stofftransport in de onverzadigde zone van de boden. Nota 171, Haren, Instituut voor Bodem-vruchtbaarheid 1987.
- [2] BURGER, F.: Terénny prieskum a laboratórne stanovenie hydrofyzikálnych charakteristik pôdy v lokalite ŠM Balvany, okr. Komárno. [Výskumná správa.] Bratislava, ÚHH SAV 1984.
- [3] DUYISVELD, W. H. M.: Entwicklung und Anwendung von Simulationsmodellen für den Wasserhaushalt und den Transport von gelosten Stoffen in wasserungesättigten Boden. Ermittlung den Nitratauswaschungsgefahr unter Ackernutzung. [Dissertation.] Berlin, Technische Universität 1984, 204 p.
- [4] GENUCHTEN, M. Th., van: On the accuracy and efficiency of several numerical schemes for solving the convective — dispersive equation. In Finite Elements in Water Resources, W. G. Gray et al. (eds.), London, Pentech Press 1976, pp. 1.71—1.90.
- [5] GENUCHTEN, M. Th., van: Mass transport in saturated-unsaturated media: one-dimensional solutions. Research report 78-WR-11, Water Resources Program, Dept. of Civil Engineering, Princeton University, Princeton, New Jersey 1978, 118 p.
- [6] GENUCHTEN, M. Th., van: A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Sci. Soc. Am. J., 44, 1980, 892—898.
- [7] GENUCHTEN, M. Th., van: A numerical model for water and solute movement in and below the root zone. Research report 121, U.S. Salinity laboratory, USDA, ARS, Riverside, California 1987.
- [8] HUYAKORN, P. S.—PINDER, G. F.: Computational methods in subsurface flow. New York, Academic press 1983.
- [9] KUTÍLEK, M.—ŠIMŮNEK, J.: Impact of the great water structure upon the soil salinization: A case study of the Southern Slovakia. In: International Conference Soil Conservation and Environment, VIIth Czechoslovak Soil Science Conference, Piešťany, VCPÚ 1989.
- [10] MUALEM, Y.: A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. Wat. Resour. Res., 1976, 12, 513—522.
- [11] RAATS, P. A. C.: Distribution of salts in the root zone. J. Hydrol., 27, 1975, 237—248.
- [12] SMAJSTRLA, A. G.—REDELLE, D. L.—HILER, E. A.: Simulation of miscible displacement in soils using the method of characteristics. Transaction of the ASEA, Michigan 18 (2), 1975, 281—292.
- [13] ŠIMŮNEK, J.—SEMOTÁN, J.: Numerická simulace transportu rozpuštěných látek v pórovitěm prostředí. Vodohosp. Čas., 36, 1988, č. 2, s. 186—198.
- [14] VOGEL, T.: SWM II — Numerical model of two-dimensional flow in a variably saturated porous medium. Research report no. 87, Dep. of Hydraulics and Catchment Hydrology, Wageningen, Agricultural University 1987.
- [15] VOGEL, T.: SWM I — Numerický model jednorozměrného proudění v nenasyčeném pórovitěm prostředí. [Disertační práce.] Praha, ČVUT, Fakulta stavební 1988.
- [16] VOGEL, T.: SWM I — Numerický model jednorozměrného proudění v nenasyčeném pórovitěm prostředí. In: XXVIII. symposium Hornická Příbram ve vědě a technice. Příbram, ČSVTS 1989.

Do redakcie došlo 16. 11. 1989  
Diskusia otvorená do 31. 8. 1991

## NUMERICAL SIMULATION OF THE TRANSPORT PROCESSES IN SOIL

Jiří Šimůnek

The model SWMI-ST designated to analyse the one-dimensional water movement and solute transport in partially saturated porous media is described. In transport equation the molecular diffusion, mechanical dispersion, adsorption and source and decay processes are included. The technique to calculate the time depth curves is proposed to model the transport of inert chemical materials not subjected to dispersion. The model is used to calculate two variants of seasonal simulation of water movement and salinization process in Southern Slovakia.

### List of symbols

$c$	— concentration of the solution [ $ML^{-3}$ ],
$C$	— hydraulic capacity [ $L^{-1}$ ],
$D$	— dispersion coefficient [ $L^2T^{-1}$ ],
$D_m$	— diffusion coefficient [ $L^2T^{-1}$ ],
$E_a$	— actual evaporation [ $LT^{-1}$ ],
$h$	— pressure head [ $L$ ],
$I_a$	— actual infiltration [ $LT^{-1}$ ],
$k$	— empirical distribution coefficient for linear adsorption [ $L^3M^{-1}$ ],
$K$	— hydraulic conductivity [ $LT^{-1}$ ],
$K_s$	— saturated hydraulic conductivity [ $LT^{-1}$ ],
$n, m, \alpha$	— parameters of retention curve [—], [—], [ $L^{-1}$ ],
$R$	— retardation faktor [—],
$s$	— adsorbed concentration [—],
$S$	— sink term [ $T^{-1}$ ],
$t$	— time [ $T$ ],
$v$	— flow rate according to Darcy's law [ $LT^{-1}$ ],
$x$	— distance [ $L$ ],
$\Phi_n$	— linear base function [—],
$\delta_{nm}$	— Kronecker delta [—],
$\gamma_0$	— rate constant for zero — order production in liquid phase [ $ML^{-3}T^{-1}$ ],
$\gamma_s$	— rate constant for zero — order production in solid phase [ $T^{-1}$ ],
$\mu_0$	— rate constant for first — order decay in liquid phase [ $T^{-1}$ ],
$\mu_s$	— rate constant for first — order decay in solid phase [ $T^{-1}$ ],
$\lambda$	— dispersivity [ $L$ ],
$\rho$	— bulk density of the soil [ $ML^{-3}$ ],
$\tau$	— tortuosity [—],
$\Theta$	— volume moisture content [—],
$\Theta_r$	— residual moisture content [—],
$\Theta_s$	— saturated moisture content [—],