

NUMERICKÁ SIMULACE TRANSPORTU ROZPUŠTĚNÝCH LÁTEK V PÓROVITÉM PROSTŘEDÍ

JIRÍ ŠIMŮNEK, JIRÍ SEMOTÁN

Článek se zabývá problematikou numerického řešení parciálních diferenciálních rovnic, které popisují jednorozměrný pohyb vody a rozpuštěných látek v nehomogenním pórovitém materiálu v podmínkách tranzientního proudění. V transportní rovnici jsou zahrnuty jevy disperze a výměny včetně produkčních a rozkladových procesů. Numerické řešení je založeno na metodě konečných rozdílů. Přesnost modelu byla ověřena srovnáním s výsledky analytického řešení a s experimentem.

Úvod

V půdní vodě se vyskytuje významné množství rozpuštěných látek, které podléhají transportu. Jsou to látky organického i anorganického původu, mohou v půdě přirozeně vznikat, např. při zvětrávání matečního substrátu, nebo mohou představovat vnější vstupy. Těmito vnějšími vstupy mohou být aplikace minerálních hnojiv a pesticidů, znečištění způsobené odpady nebo haváriemi v průmyslu, různé emise a exhalace [3]. Některé chemické látky zůstávají v kořenové zóně, nebo jsou odvedeny kořeny rostlin, jiné jsou transportovány přes nenasycenou zónu k hladině podzemní vody a stávají se potenciálním nebezpečím při znečišťování podzemních vodních zdrojů. Abychom mohli omezit negativní vliv chemických látek v půdním prostředí, je třeba vlastnit nástroj ke kvantitativnímu popisu jejich šíření.

Pohyb vody a transport rozpuštěných látek v půdě je popsán parciálními diferenciálními rovnicemi druhého řádu. Analytické řešení těchto rovnic předpokládá jejich zjednodušení, např. pro stacionární podmínky proudění, pro horizontální proudění apod. Obecné řešení předpokládá použití numerických postupů založených na metodách konečných diferencií a konečných prvků.

V tomto článku předkládáme stručný popis vypracovaného simulačního modelu jednorozměrného transportu rozpuštěných látek za tranzientních pod-

Ing. Jiří Šimůnek, Výzkumný ústav pro zúrodnění zemědělských půd, Žabovřeská 250, 156 00 Praha 5-Zbraslav.

Ing. Jiří Semotán, CSc., Katedra hydromeliorací FSv ČVUT, Thákurova 7, 166 29 Praha 6.

GESCHWINDIGKEITSVERTEILUNG DER STATIONÄREN
LAMINAREN, LOKALNEWTONISCHEN SUSPENSIONSTRÖMUNG
IN EINER HORIZONTALER ROHRLEITUNG

Jaroslav Hrbek, Miroslav Severa

Auf dem Grunde der Arbeit [3] wurde eine dünne Suspensionströmung Flüssigkeit — feste Teilchen betrachtet. Es wird eine Methode der teilweisen Integration der Differentialgleichung (7) und (13) vorgelegt, die die laminare stationäre Suspensionströmung in einer horizontalen kreisförmigen Rohrleitung beschreibt.

Die Methode der teilweisen Integration ist auf dem Grunde der Berechnung der mittleren Geschwindigkeiten in den horizontalen Schichten des Rohrprofils errichtet (10). Benützt man diese Prozedur und auf die Gleichung (13) appliziert, bekommt man eine gewöhnliche lineare Gleichung (23) oder (26). Die Lösung dieser Gleichung zeigen die Formeln (33), (48) und (53).

Symbolverzeichnis

- $c\ddagger$ — Volumkonzentration [—],
- g — Erdbeschleunigung [ms^{-2}],
- H — Druckhöhe [m],
- K — Konstante [m^2s^{-2}],
- n — Nummer [—],
- p — Druck [Pa],
- P — Spannungstensor [Pa],
- r — Koordinate [m],
- R — Rohrhalmmesser, Zustandkonstante [$\text{m}, \text{m}^2\text{s}^{-2}\text{K}^{-1}$],
- T — absolute Temperatur [K],
- v — Geschwindigkeit [ms^{-1}],
- x — Koordinate [m],
- y — Koordinate [m],
- z — Koordinate [m],
- ε — Grenzschichtdicke [m],
- μ — dynamische Viskosität [Pa·s],
- ρ — Dichte [kgm^{-3}],
- ρ^* — partielle Dichte [kgm^{-3}],
- φ — Koordinate [—].

Indexen

- p — feste Teilchen,
- v — Flüssigkeit,
- sm — Gemische.

mínek proudění v porézním prostředí. Současně jsou srovnány výsledky modelu s experimentem a s výsledky analytického řešení za zjednodušených podmínek stacionárního proudění.

Popis pohybu kapaliny v pórovitém prostředí

Pohyb kapaliny v pórovitém materiálu je popsán Richardsovou rovnicí (1) pro nenasycené proudění a rovnicí Laplaceovou (2) pro proudění nasycené [7]. Pro horizontální pohyb se v rovnicích anulují člen $\text{grad } x$.

$$C(h(x, t), x) \partial h(x, t) / \partial t = \text{div} \{K(h(x, t), x) [\text{grad } h(x, t) - \text{grad } x]\}, \quad (1)$$

$$0 = \text{div} \{Ks(x) [\text{grad } h(x, t) - \text{grad } x]\}. \quad (2)$$

V těchto rovnicích značí x souřadnici (pro vertikální pohyb kladně orientovanou ve směru gradientu gravitačního potenciálu), t je čas a h je tlaková výška. Pokud $\text{sign } h = +$, jde o tlak v kapalině, která plně zaplňuje póry materiálu, pokud $\text{sign } h = -$, jde o sací tlak. Retenční křivka $h(\Theta)$ a závislost vodivosti na objemové vlhkosti $K(\Theta)$ jsou hydraulické charakteristiky, jejichž prostřednictvím se do rovnic (1) a (2) zobrazují vlastnosti pórovitého materiálu. Hydraulická (specifická vodní) kapacita se odvozuje přímo z retenční křivky podle vztahu (3)

$$C(\Theta) = d\Theta(h) / dh. \quad (3)$$

Retenční křivka umožňuje vyjádřit hydraulické charakteristiky $K(\Theta)$ a $C(\Theta)$ ve tvaru $K(h)$ a $C(h)$, jak to vyžadují rovnice (1) a (2). Tlaková výška h je funkcí času, takže výrazy $K(h(x, t), x)$ a $C(h(x, t), x)$ jsou časoprostorová pole vodivosti a kapacity odvozená z prostorových polí hydraulických charakteristik pro $h(x, t)$. V případě nasyceného materiálu je vodivost nezávislá na tlaku v kapalině a dosahuje hodnoty Ks , která se obvykle nazývá nasycená vodivost. Rovnice (1) přechází na rovnici (2) anulací kapacity při vlhkosti Θ_s .

$$C(h \geq 0) = 0. \quad (4)$$

Rovnice (1) a (2) popisují pohyb kapaliny v pórovitém materiálu vyplňujícím nějakou prostorovou oblast. Interakce s okolím oblasti popisují okrajové podmínky. Na horním okraji je použita jedna z následujících tří podmínek:

$$h(0, t) = h_0(t), \quad (5)$$

$$-K(h(0, t), 0) [\text{grad } h(0, t) - \text{grad } x] = v_0(t), \quad (6)$$

$$dh(0, t) / dt - K(h(0, t), 0) [\text{grad } h(0, t) - \text{grad } x] = v_0(t). \quad (7)$$

Index o značí hodnoty na horním okraji a v_0 je rychlost na horním okraji

(infiltrace, výpar). Rovnice (7) platí pouze pro případ, kdy $h(0, t) > 0$. Na dolním okraji jsou opět použity tři možnosti okrajových podmínek:

$$h(L, t) = h_L(t), \quad (8)$$

$$-K(h(L, t), L) [\text{grad } h(L, t) - \text{grad } x] = v_L(t), \quad (9)$$

$$\text{grad } h(L, t) = \text{const}, \quad (10)$$

kde index L značí hodnoty na dolním okraji.

V počátečním čase musí být v celé oblasti zadána počáteční podmínka

$$h(x, 0) = h_i(x). \quad (11)$$

Popis pohybu rozpuštěných látek v pórovitém prostředí

Transport rozpuštěných látek v pórovitém materiálu je popsán transportní rovnicí [2].

$$\begin{aligned} \partial[\Theta(h(x, t), x) c(x, t) + \rho(x) S(x, t)] / \partial t = \text{div}[\Theta(h(x, t), x) D(h(x, t), x) \cdot \\ \cdot \text{grad } c(x, t) - v(x, t) \cdot \Theta(c(x, t))] - \mu_i(x) \Theta(h(x, t), x) c(x, t) - \\ - \mu_s(x) \rho(x) S(x, t) + \gamma_i(x) \Theta(h(x, t), x) + \gamma_s(x) \rho(x). \end{aligned} \quad (12)$$

V této rovnici značí c koncentraci rozpuštěných látek v kapalině, ρ objemovou hmotnost a D je disperzní koeficient. Disperzní koeficient je obecný parametr, který zahrnuje všechny mechanismy ovlivňující transport rozpuštěných látek, které nejsou v rovnici (12) přímo zavedeny. Všeobecně se předpokládá, že disperze je způsobena hlavně dvěma jevy: molekulární difúzí a hydrodynamickou disperzí. Molekulární difúze je aktivní proces, jehož hnací silou je gradient koncentrace a který je nezávislý na pohybu kapaliny, zatímco hydrodynamická disperze je pasivní proces, způsobený pohybem kapaliny v pórovitém prostředí. Je důsledkem rozdělení rychlostí uvnitř jednotlivých pórů a mezi póry různých velikostí, tvarů a směrů. Disperzní koeficient je definován rovnicí (13)

$$D(h(x, t), x) = Dm(x) \tau(x) + \lambda(x) [v(x, t) / \Theta(h(x, t), x)], \quad (13)$$

kde Dm je koeficient molekulární difúze, τ je faktor tortuosity, λ je disperzivita a v darcyovská rychlost (14)

$$v(x, t) = -K(h(x, t), x) [\text{grad } h(x, t) - \text{grad } x]. \quad (14)$$

Nekonzervativnost proudění v rovnici (12) je popsána pomocí rychlostních konstant prvního řádu μ_i a μ_s pro propad v kapalně, resp. pevné fázi, rychlostních konstant nultého řádu γ_i a γ_s pro zdroj v kapalně, resp. pevné fázi a pomocí adsorbovaného množství S vyjádřeného adsorpční izotermou

$$S(x, t) = k(x) c(x, t), \quad (15)$$

kde k značí sklon adsorpční izotermy $S(c)$. Příkladem zdrojů a propadů může být radioaktivní rozpad, chemické rozpouštění, absorpce kořeny rostlin, spotřeba a transformace chemických látek půdními mikroorganismy, oxidační a redukční propady atd.

Zavedením výrazu (15) a retardačního faktoru R

$$R(h(x, t), x) = 1 + \rho(x) k(x) / \Theta(h(x, t), x) \quad (16)$$

do rovnice (12) získáme výchozí rovnici (17) pro numerické řešení. Struktura funkce není popsána, neboť je zřejmá z předchozích rovnic.

$$\partial(\Theta R c) / \partial t = \text{div}(\Theta D \text{grad } c - v c) - (\mu_i \Theta + \mu_s \rho k) c + \gamma_i \Theta + \gamma_s \rho. \quad (17)$$

Rovnice (17) popisuje transport rozpuštěných látek v pórovitém materiálu v podmínkách nenasyceného i nasyceného proudění na prostorové oblasti. Interakce s okolím oblasti popisují okrajové podmínky. Na horním okraji jsme v našem modelu uvažovali jak okrajovou podmínku stabilní

$$c(0, t) = c_0(t), \quad (18)$$

tak nestabilní

$$\begin{aligned} -\Theta(h(0, t), 0) D(0, t), 0 \text{ grad } c(0, t) + v(0, t) c(0, t) = \\ = v_0(t) c_0(t) \text{ pro } v_0(t) > 0, \end{aligned} \quad (19)$$

$$= 0 \text{ pro } v_0(t) \leq 0,$$

kde $c_0(t)$ je koncentrace infiltrující vody a $v_0(t)$ je stejná rychlost jako v (6) a (7). Na dolním okraji je použita buď stabilní podmínka

$$c(L, t) = C_L(t), \quad (20)$$

kde $C_L(t)$ je koncentrace podzemní vody, nebo pro případ volné drenáže

$$\text{grad } c(L, t) = 0. \quad (21)$$

Počáteční podmínka je zadána hodnotami koncentrace.

$$c(x, 0) = c_i(x). \quad (22)$$

Numerické řešení

K diskretizaci rovnic (1) a (2) byla použita metoda konečných diferencí v prostoru i v čase. Pro časovou diskretizaci bylo použito plně implicitní schéma navržené M1sem [1]. Základní informace o jednorozměrném simulačním modelu pohybu kapaliny v porézním prostředí uvádí Vogel et al. [12].

K diskretizaci transportní rovnice (17) je rovněž použita metoda konečných diferencí v prostoru i v čase s tím rozdílem, že pro časovou diskretizaci není nutné použít plně implicitní schéma ($e = 1$), které vede ke zploštění koncentračního čela. Pokud chceme získat co nejpřesnější tvar průnikové křivky, je nevhodnější použít implicitní schéma Crankovo–Nicolsonovo ($e = 0,5$), ovšem s určitým nebezpečím výskytu oscilací na koncentračním čele.

Po zavedení opravných faktorů odvozených Van Genuchtenem [8] do výpočtu disperzního koeficientu

$$D^-(h(x, t), x) = D(h(x, t), x) - v^2(x, t) \Delta t / 6 \Theta^2(h(x, t), x) R(h(x, t), x), \quad (23)$$

$$D^+(h(x, t), x) = D(h(x, t), x) + v^2(x, t) \Delta t / 6 \Theta^2(h(x, t), x) R(h(x, t), x)$$

a po diskretizaci je možné rovnici (17) přepsat do tvaru:

$$\begin{aligned} & [(\Theta_i R_i c_i)^{j+1} - (\Theta_i R_i c_i)^j] \Delta x / \Delta t = e [\Theta_b D_b^- (c_{i+1} - c_i) / \Delta x_b - v_b c_b - \\ & - \Theta_a D_a^- (c_i - c_{i-1}) / \Delta x_a + v_a c_a - \Delta x (\mu_i \Theta_i + \mu_{si} \Theta_i k_i) c_i + \Delta x (\gamma_i \Theta_i + \\ & + \gamma_{si} \Theta_i)^{j+1} + (1 - e) [\Theta_b D_b^+ (c_{i+1} - c_i) / \Delta x_b - v_b c_b - \Theta_a D_a^+ (c_i - \\ & - c_{i-1}) / \Delta x_a + v_a c_a - \Delta x (\mu_i \Theta_i + \mu_{si} \Theta_i k_i) c_i + \Delta x (\gamma_i \Theta_i + \gamma_{si} \Theta_i)^j], \end{aligned} \quad (24)$$

kde: $\Delta x_a = x_i - x_{i-1}$; $\Delta x_b = x_{i+1} - x_i$; $\Delta x = (\Delta x_a + \Delta x_b) / 2$; $\Delta t = t_{j+1} - t_j$;
 $a = i - 1/2$; $b = i + 1/2$;
 i — index uzlu (stoupající ve směru orientace osy x ; $i = 1, 2, \dots, n$),
 j — časový index.

Vážené hodnoty s indexy a, b jsou vypočteny jako aritmetický průměr z hodnot v sousedních bodech.

Rovnice (24) platí pro vnitřní body oblasti, tzn. že vytváří soustavu o $(n - 2)$ lineárních rovnicích s n neznámými hodnotami c_i . Zbývající dvě rovnice mohou být získány diskretizací okrajových podmínek (18) až (21).

Jak vyplývá z předchozích dvou kapitol, pohyb vody a rozpuštěných látek v pórovitém prostředí v podmínkách tranzientního proudění je plně popsán rovnicemi (1), (2), (17) a okrajovými a počátečními podmínkami. Ze struktury funkcí rov. (1) a (2) je zřejmé, že tyto rovnice jsou zcela nezávislé na řešení vztahu (17). Z toho vyplývá, že podle tohoto matematického modelu pohyb vody v pórovitém prostředí není ovlivněn transportem rozpuštěných látek a je možné řešení rov. (1) a (2) zcela osamostatnit. Naproti tomu v rovnici (17) vystupují proměnné, které jsou závislé na tlakové výšce h , která je výsledkem řešení rovnic (1) a (2), takže k řešení transportu rozpustných látek je možno přistoupit až po vyřešení pohybu kapaliny v pórovitém prostředí.

Na základě tohoto faktu byl vytvořen jednorozměrný numerický simulační model, který je rozdělen do dvou částí:

1. jednorozměrný numerický simulační model pohybu kapaliny v pórovitém prostředí (upravený model, jehož popis uvádí Vogel et al. [12]);

2. jednorozměrný numerický simulační model transportu rozpuštěných látek v pórovitém prostředí.

První část vždy předchází část druhou, neboť model transportu rozpuštěných látek zpracovává výsledky modelu pohybu kapaliny.

Vlastní simulace probíhá následujícím způsobem: Na každé časové úrovni t_n se postupně řeší soustava lineárních rovnic vzniklá diskretizací rovnic (1) a (2), sestavená pro všechny vnitřní uzly řešené oblasti, spolu se zavedenými okrajovými podmínkami v krajních uzlech. Protože koeficienty $K(h)$ a $C(h)$ jsou nelineární vzhledem k neznámé funkci $h(x, t_n)$, probíhá na každé časové úrovni iterační řešení soustavy rovnic. Po skončení iteračního procesu (neznámá funkce $h(x, t_n)$ se ve dvou po sobě jdoucích iteracích liší dostatečně málo) se přejde na další časovou úroveň. Takto se postupuje až do dosažení nějakého předem daného stavu, nejčastěji do dosažení konečné hodnoty času. Získaná tlaková pole $h(x, t)$ slouží jako vstup pro následující simulaci transportu rozpuštěných látek. Na každé časové úrovni t_n se pomocí diskretizované rovnice (17) a tlakového pole $h(x, t_n)$ sestaví pro všechny vnitřní body soustava lineárních rovnic a v krajních bodech se zavedou okrajové podmínky. Jelikož v rovnici (17) nevyskytují proměnné nelineárně závislé na neznámé $c(x)$, tzn. že rov. (17) je lineární, po vyřešení soustavy se přímo přechází na další časovou úroveň.

Numerické a analytické řešení pro modelové příklady

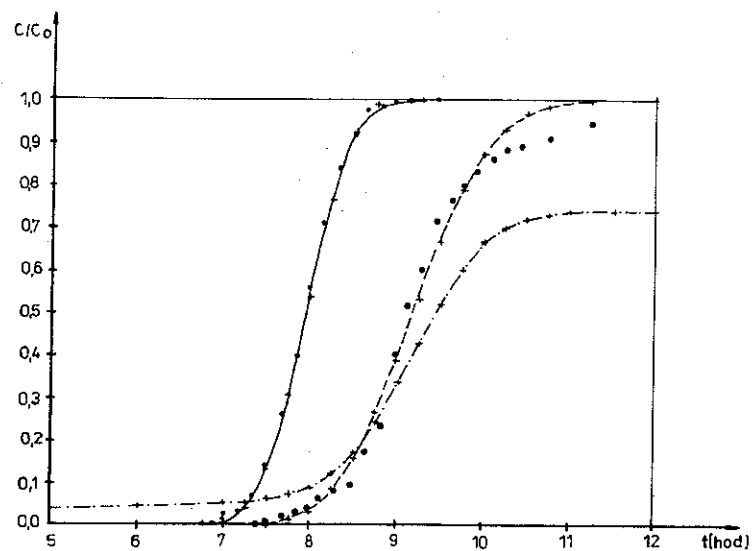
Aby bylo možno otestovat správnost numerického modelu popisujícího současně proudění vody a transport rozpuštěných látek v nasyceném i nenasyčeném pórovitém prostředí, je třeba vybrat takové modelové jevy, které umožní porovnat výsledky numerické simulace s analytickým řešením transportní rovnice nebo s výsledky experimentu.

Podrobný popis experimentu na laboratorních sloupcích byl publikován Semotánem [4], [5], [6]. Některé fyzikální, chemické a transportní parametry vybraného experimentu jsou uvedeny v tab. 1. Jednalo se o stacionární proudění svislým sloupcem písčitého materiálu. Sloupec byl vysoký 30 cm, na horním okraji byl od času $t = 0$ aplikován roztok $MgCl_2$. Na spodním okraji ze sloupce kapalina vytékala do volna. Chemickým rozborem vytékající kapaliny byly získány průnikové křivky vykreslené na obr. 1.

Jelikož se jednalo o stacionární podmínky proudění bez produkčních a rozkladových jevů, bylo možno probíhající proces popsat zjednodušenou transportní rovnicí (17).

Tabulka 1. Fyzikální, chemické a transportní parametry půdních vzorků pro Třebusický písek

| | |
|--|-------------------------|
| Objemová hmotnost ρ [kg m ⁻³] | 1653 |
| Nasyčená vlhkost Θ_s [m ³ m ⁻³] | 0,369 |
| Darcyovská rychlost v [m s ⁻¹] | $3,8745 \cdot 10^{-6}$ |
| Vstupní koncentrace c_0 [kg m ⁻³] | 1,216 MgCl ₂ |
| Počáteční koncentrace c_i [kg m ⁻³] | 0 |
| <hr/> | |
| Cl Retardační faktor R [—] | 1 |
| Disperzní koeficient D [m ² s ⁻¹] | $3,889 \cdot 10^{-9}$ |
| <hr/> | |
| Mg Retardační faktor R [—] | 1,16 |
| Disperzní koeficient D [m ² s ⁻¹] | $8,972 \cdot 10^{-9}$ |
| <hr/> | |
| Rychlostní konstanta nultého řádu γ [kg m ⁻³ s ⁻¹] | $3,377 \cdot 10^{-6}$ |
| Rychlostní konstanta prvního řádu μ [s ⁻¹] | $1,3889 \cdot 10^{-5}$ |



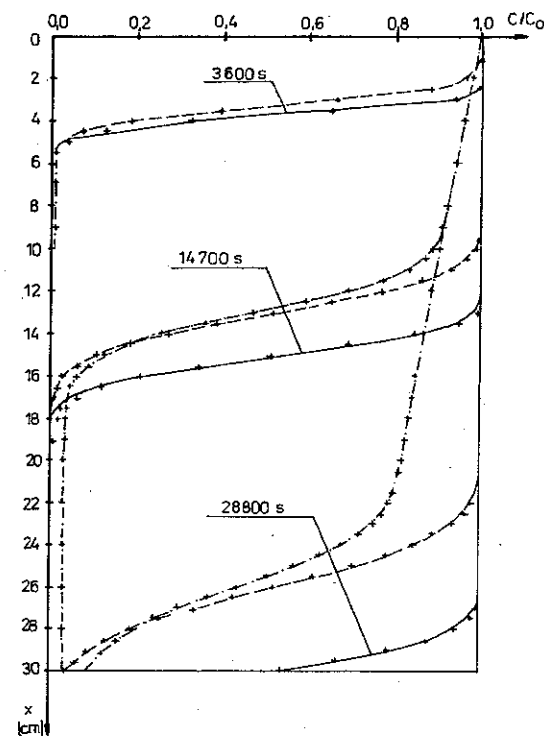
Obr. 1. Experimentální a počítané křivky pro Cl⁻ a Mg²⁺ pro Třebusický písek. o o o experimentální body pro Cl⁻, ● ● ● experimentální body pro Mg²⁺, + + + numerické řešení, — analytické řešení pro Cl⁻, - - - analytické řešení pro Mg²⁺, - - - analytické řešení pro Mg²⁺ se zdroji a propady.

$$R \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} - v/\Theta \cdot \frac{\partial c(x, t)}{\partial x}. \quad (25)$$

Řešení této rovnice pro okrajové podmínky (18) a (21) a počáteční podmínku (22) provedli Lapidus a Amundson (1952), citováni v [11].

$$c(x, t) = c_i + (c_0 - c_i) \cdot \{0,5 \cdot \text{erfc}[(Rx - vt)/2/(DRt)^{0,5}] + 1/2 \cdot \exp(vx/D) \cdot \text{erfc}[(Rx + vt)/2/(DRt)^{0,5}]\}. \quad (26)$$

V rov. (26) vystupují dva neznámé parametry D a R , které byly optimalizovány pomocí Marquardtova kompromisu [9] tak, aby řešení co nejlépe vystihlo průběh experimentálních dat. Průnikové křivky získané analytickým řešením a simulačním modelem jsou vykresleny na obr. 1. Obě teoretická řešení jsou prakticky identická a velmi dobře prokládají experimentální body. V případě Cl iontů se jedná o symetrickou průnikovou křivku kolem času t , kdy je v sloupci



Obr. 2. Koncentrační profily pro Cl⁻ a Mg²⁺ pro Třebusický písek. Značení stejné jako u obr. 1.

nahrazena veškerá původní kapalina. V případě Mg kationtů je průniková křivka znatelně posunuta doprava, což je způsobeno iontovou výměnou ($Mg^{2+} \rightarrow Ca^{2+}, K^+, Na^+$). Experimentální body mají mírně asymetrický průběh, křivka je prodloužena směrem k vyšším časům. Tento jev je vysvětlován např. existencí mobilní a imobilní vody, přičemž přenos látky konvekci se děje pouze v mobilní části [10]. Tento jev není v navrženém modelu zahrnut, a proto simulovaná průniková křivka v oblasti vyšších časů přesně nevystihuje průběh experimentálních dat. Výsledkem analytického řešení a simulačního výpočtu jsou též koncentrační profily, které nebyly získány experimentem. Příklady koncentračních profilů pro časy 1, 4 a 8 hodin jsou vykresleny na obr. 2.

Abychom mohli demonstrovat vliv zdrojových a propadových procesů, provedli jsme též simulaci pro zvolené rychlostní konstanty. Diferenciální rovnice pro stacionární proudění se zdroji a propady má tvar

$$R \partial c(x, t) / \partial t = D \partial^2 c(x, t) / \partial x^2 - v / \Theta \cdot \partial c(x, t) / \partial x - \mu c(x, t) + \gamma, \quad (27)$$

kde

$$\mu = \mu_1 + \mu_2 \rho k / \Theta, \quad (28)$$

$$\gamma = \gamma_1 + \gamma_2 \rho / \Theta \quad (29)$$

a její analytické řešení pro okrajové podmínky (18) a (21) a počáteční podmínku (22) provedl Bear (1972). Výsledný tvar rozměrných rovnic přináší literatura [11].

Výpočet byl proveden pro parametry získané analýzou experimentu s Mg kationty a pro zvolené rychlostní konstanty. Rychlostní konstantu prvního řádu pro propad jsme zvolili jako pětinašobek rychlostní konstanty nultého řádu pro zdroj. Průniková křivka i koncentrační profily získané analytickým řešením i simulačním výpočtem jsou rovněž zakresleny na obr. 1 a 2. Celá průniková křivka je mírně skloněna a již od počátečního času se objevuje malá koncentrace vlivem zdrojového členu. Postupně převládá vliv propadového členu, následkem čehož není nikdy dosažena jednotková poměrná koncentrace c/c_0 , která se ustaluje na nižší hodnotě.

Závěr

V článku byl předložen stručný popis numerického simulačního modelu jednorozměrného transportu rozpuštěných látek za tranzientních podmínek proudění v pórovitém prostředí. Jeho použitelnost byla demonstrována srovnáním numerické simulace s experimentem a s analytickým řešením.

Průnikové čáry a koncentrační profily vypočtené pomocí simulačního mode-

lu a pomocí analytického řešení jsou prakticky identické. Také tvar a poloha vypočtených průnikových čar a naměřených experimentálních hodnot vykazují vysokou shodu. Z toho je zřejmé, že předložený simulační model poskytuje přesný odhad pohybu kapaliny a rozpuštěných látek v pórovitém prostředí.

Seznam symbolů

- c — koncentrace roztoku [$kg\ m^{-3}$],
- C — hydraulická kapacita [m^{-1}],
- Dm — disperzní koeficient [$m^2\ s^{-1}$],
- D — koeficient molekulární difúze [$m^2\ s^{-1}$],
- h — tlaková výška [m],
- k — distribuční koeficient pro lineární adsorpci [$m^3\ kg^{-1}$],
- K — hydraulická vodivost [$m\ s^{-1}$],
- R — retardační faktor [—],
- S — adsorbované množství [—],
- v — Darcyovská rychlost [$m\ s^{-1}$],
- x — souřadnice [m],
- t — čas [s],
- γ_1 — rychlostní konstanta nultého řádu pro zdroj v kapalně fázi [$kg\ m^{-3}\ s^{-1}$],
- γ_2 — rychlostní konstanta nultého řádu pro zdroj v pevně fázi [s^{-1}],
- μ_1 — rychlostní konstanta prvního řádu pro propad v kapalně fázi [s^{-1}],
- μ_2 — rychlostní konstanta prvního řádu pro propad v pevně fázi [s^{-1}],
- λ — disperzivita [m],
- ρ — objemová hmotnost [$kg\ m^{-3}$],
- τ — tortuozita [—],
- Θ — objemová vlhkost [$m^3\ m^{-3}$].

LITERATURA

- [1] MĽS, J.: Formulace a řešení základních úloh pro vertikální infiltraci. *Vodohosp. Čas.*, 30, 1982, č. 3, s. 304—313.
- [2] NIELSEN, D. R. — VAN GENUCHTEN, M. T. — BIGGAR, J. W.: Water flow and solute transport processes in the unsaturated zone. *Wat. Resour. Res.*, Vol. 22, No. 9, s. 898—1088.
- [3] PAVEL, P. — KOZÁK, M. — PROCHÁZKA, J.: Pohyb rozpustných látek s půdním roztokem. Praha, VŠZ 1985.
- [4] SEMOTÁN, J.: The application of radionuclides for laboratory measurement of dispersion under condition of unsaturated flow. *Mem. of Int. Symp. IASH, Part 2, Praha 1982*, s. 229—234.
- [5] SEMOTÁN, J.: Transport rozpuštěných látek v půdě. *Šborník symposia Jakost závlahové vody, Brno, ČSVTS 1985*, s. 135—146.
- [6] SEMOTÁN, J.: Solute transport in irrigated soil. *Scientia agriculturae bohemoslovaca 1*. Praha, ÚVTIZ 1987.
- [7] ŠÍR, M. — ČÍSLEROVÁ, M. — VOGEL, T.: Numerická simulace pohybu kapaliny v pórovitém materiálu. *Vodohosp. Čas.*, 34, 1986, č. 2, s. 190—204.
- [8] VAN GENUCHTEN, M. T.: Mass transport in saturated-unsaturated media: one dimensional solution. *Wat. Resour. Program, New Jersey, Princeton Univ. 1978*.

- [9] VAN GENUCHTEN, M. T.: Determining transport parameters from solute displacement experiment. U.S. Salinity Lab., Riverside, California, Research report No. 118, 1980.
- [10] VAN GENUCHTEN, M. T.: Non-equilibrium transport parameters from miscible displacement experiment. Dpt. of Agricult., Salinity lab., Riverside, Res. rep. No. 119, 1981.
- [11] VAN GENUCHTEN, M. T. — ALVES, W. J.: Analytical solution of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation. U.S. Dept. of Agricult. Tech. Bull. No. 1661, 1982.
- [12] VOGEL, T. — ŠÍR, M. — ŠIMŮNEK, J. — DAMAŠKOVÁ, H.: Analýza chování jednorozměrného simulačního modelu pohybu vody v půdě. [Zpráva za časovou etapou.] Praha, VÚZPP 1986.

Do redakcie došlo 20. 10. 1987
Diskusia otvorená do 31. 10. 1988

НУМЕРИЧЕСКАЯ СИМУЛЯЦИЯ ТРАНСПОРТА РАСТВОРОВ В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ

Иржи Шимушек, Иржи Семотан

Статья разрешает вопрос численного решения парциальных дифференциальных уравнений описывающих одномерное движение воды и растворных веществ в неомогенной пористой среде при условии транзитного течения. В транспортном уравнении заключены явления дисперсии и ионных обмен как и производственные и замедленные процессы. Численное решение основано на методе конечных разностей. Точность модели была проверена с результатами аналитического решения и экспериментов.

Список обозначений

- c — концентрация раствора [кг м^{-3}],
 C — гидравлическая емкость [м],
 D — дисперсионный коэффициент [$\text{м}^2 \text{с}^{-1}$],
 Dm — коэффициент молекулярной диффузии [$\text{м}^2 \text{с}^{-1}$],
 h — напорная высота [м],
 k — дистрибутивный коэффициент для линейной адсорпции [$\text{м}^3 \text{кг}^{-1}$],
 R — фактор замедления [—],
 S — адсорбированное количество [—],
 v — скорость Дарси [мс^{-1}],
 x — координата [м],
 t — время [с],
 γ_l — константа скорости нулевого порядка для источника в жидкой фазе [$\text{кг м}^3 \text{с}^{-1}$],
 γ_s — константа скорости нулевого порядка для источника в твердой фазе [с^{-1}],
 μ_l — константа скорости первого порядка для распада в жидкой фазе [с^{-1}],
 μ_s — константа скорости первого порядка для распада в твердой фазе [с^{-1}],
 λ — дисперсивность [м],
 ρ — удельный вес [кг м^{-3}],
 τ — тортуозита [—],
 θ — объемная влажность [м м^{-3}].

Рис. 1. Экспериментальные и численные принимаемые кривые Cl^- и Mg^{2+} для песка из Требусице. $\circ\circ\circ$ экспериментальные точки для Cl^- , $\bullet\bullet\bullet$ экспериментальные точки для Mg^{2+} , $+++$ численное решение. — аналитическое решение для Cl^- , --- аналитическое решение для Mg^{2+} , - - - - аналитическое решение для Mg^{2+} с источниками и провалами.

Рис. 2. Концентрационные профили для Cl^- и Mg^{2+} в песку из Требусице. Маркировка равная как в рис. 1.

Табл. 1. Физические, химические и транспортные параметры образцов песка из Требусице.

NUMERICAL SIMULATION OF THE SOLUTE TRANSPORT IN POROUS MEDIA

Jiří Šimůnek, Jiří Semotán

In the paper problems linked with the numerical solution of partial differential equations describing the flow of water and solute transport in porous media are treated. The model simulating the one dimensional solute transport in porous nonhomogenous media during the transient flow is introduced. In the transport equation the phenomena of dispersion, adsorption or exchange reaction, production and/or decay are included. The Richards' and the transport equations are solved using finite differences for the space and time discretisation. The applicability of the model is checked with both analytical and experimental results.

List of symbols

- c — the concentration of the solution [kg m^{-3}],
 C — hydraulic capacity [m^{-1}],
 D — dispersion coefficient [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$],
 Dm — diffusion coefficient [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$],
 h — pressure head [m],
 k — empirical distribution coefficient for linear adsorption [$\text{m}^3 \text{kg}^{-1}$],
 K — hydraulic conductivity [m s^{-1}],
 R — retardation factor [—],
 S — adsorbed concentration [—],
 v — flow rate according to Darcy's law [ms^{-1}],
 x — distance [m],
 t — time [s],
 γ_l — rate constant for zero-order production in liquid phase [$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$],
 γ_s — rate constant for zero-order production in solid phase [s^{-1}],
 μ_l — rate constant for first-order decay in liquid phase [s^{-1}],
 μ_s — rate constant for first-order decay in solid phase [s^{-1}],
 λ — dispersivity [m],
 ρ — bulk density of the soil [kg m^{-3}],
 τ — tortuosity [—],
 θ — volume moisture content [$\text{m}^3 \text{m}^{-3}$].

Fig. 1. Experimental and calculated breakthrough curves of Cl^- and Mg^{2+} for Trebusice sand. $\circ \circ \circ$ exp. points for Cl^- , $\bullet \bullet \bullet$ exp. points for Mg^{2+} , $+++$ numerical solution, $---$ analytical solution for Cl^- , $---$ analytical solution for Mg^{2+} , $----$ analytical solution for Mg^{2+} including the decay and production.

Fig. 2. Concentration profiles of Cl^- and Mg^{2+} for Trebusice sand. (Symbols are the same as in Fig. 1.)

Table 1. Physical, chemical and transport parameters for soil samples for Trebusice sand.