

ČESKÁ ZEMĚDĚLSKÁ UNIVERZITA V PRAZE  
FAKULTA ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ

Katedra vodního hospodářství  
a enviromentálního modelování

---

# Sdružené transportní procesy

---

Diplomová práce

Vedoucí práce: doc. Ing. Michal Kuráž Ph.D.

Diplomant: Jakub Jeřábek

2015

## **Prohlášení**

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval pod vedením doc. Ing. Michala Kuráže Ph.D., a že jsem uvedl všechny literární prameny, ze kterých jsem čerpal.

V Praze dne 22. dubna 2015

.....

## **Poděkování**

Na tomto místě bych rád poděkoval doc. Ing. Michalu Kurážovi Ph.D. za kamarádský a podnětný přístup při vedení této diplomové práce a za pomoc s implementací modelu. V neposlední řadě bych rád poděkoval svým rodičům.

## Abstrakt

Cílem této práce bylo rozšíření modelu DRU<sub>t</sub>ES o modul umožňující výpočet sdruženého transportu vlhkosti, tepla a mísitelné látky v proměnlivě nasyceném porézním prostředí. Jednalo se především o implementaci konstitučních vztahů popisujících sdružený transport do zdrojového kódu modelu ve smyslu Galerkinovy metody konečných prvků. Kromě implementace těchto vztahů bylo třeba vytvořit systém načítání konfiguračních souborů do datových struktur modelu a udělat několik spíše menších úprav kódu modelu. Správnost implementace jsem ověřil porovnáním numerického a analytického řešení jednotlivých transportních procesů. Transport vlhkosti jsem porovnal s Philipsovým semi-analytickým řešením Richardsovy rovnice v difuzním tvaru. Transport tepla a mísitelné látky s analytickým řešením advekčně disperzní rovnice. Tato srovnání ukázala vyhovující podobnost numerického a analytického řešení a ověřila správnost implementace. Vliv sdružení na transport jsem porovnal s numerickým řešením nesdružených transportů. V tomto případě jsem určoval správnost implementace toků spíše kvalitativně srovnáním s odbornou literaturou. Před případným použitím je třeba provést validaci sdruženého modelu porovnáním s měřenými daty.

**Klíčová slova:** Sdružené transportní procesy, transport vlhkosti, transport tepla, transport mísitelné látky, nenasyčená zóna, porézní prostředí, metoda konečných prvků

## Abstract

The objective of this thesis was to implement a new module to the DRU<sub>t</sub>ES model code, which allows to calculate coupled transport of moisture, temperature and miscible substance in a variably saturated porous media. The main part of the practical phase of the thesis was to implement appropriate constitutive relationships describing a coupled transport to the Galerkin finite elements scheme previously implemented in the DRU<sub>t</sub>ES model. Besides this, a corresponding configuration files were made to assign parameters of the model into program data structures as well as a little bit of other programming work elsewhere in the code. Numerical solution of each transport equation was compared with its analytical solution. 1D moisture transport with the Philips semi-analytic solution of diffusive form of Richards equation. 2D temperature and miscible substance transport with an analytical solution of advection-dispersion equation. This comparisons suggested that the implementation was correct. The coupling of these processes was compared with a reference numerical solution. In this case was the fitness of results assessed in more qualitative manner with a literature. Before use of this coupled model to solve a real world problem, I would recommend to make a similar assessment with the real data.

**Key words:** Coupled transport processes, moisture transport, temperature transport, miscible substance transport, unsaturated zone, porous media, finite elements method

# Obsah

|   |            |
|---|------------|
| <b>Abstrakt</b>   | <b>iii</b> |
| <b>Obsah</b>  | <b>vi</b>  |
| <b>Seznam zkratek</b>   | <b>vii</b> |
| <b>1 Úvod</b>   | <b>1</b>   |
| 1.1 Metodika . . . . .  | 2          |
| <b>2 Teorie</b>   | <b>3</b>   |
| 2.1 Porézní prostředí a nenasycená zóna . . . . .   | 3          |
| 2.2 Potenciál půdního prostředí . . . . .   | 5          |
| 2.3 Retenční charakteristika porézního prostředí . . . . .  | 7          |
| 2.4 Tok vlhkosti půdním prostředím . . . . .  | 9          |
| 2.4.1 Darcyho zákon a hydraulická vodivost . . . . .  | 9          |
| 2.4.1.1 Vliv teploty na nenasycenou hydraulickou vodivost . . . . .                                 | 11         |
| 2.4.1.2 Vliv koncentrace mísitelné látky na nenasycenou hydraulickou vodivost . . . . .             | 15         |
| 2.4.2 Vliv teplotního a koncentračního gradientu na proudění tekutin v porézním prostředí . . . . . | 17         |
| 2.4.2.1 Tok kapalné fáze. . . . .   | 18         |
| 2.4.2.2 Tok plynné fáze. . . . .  | 23         |
| 2.5 Řídící rovnice . . . . .  | 28         |
| 2.5.1 Transport vlhkosti . . . . .  | 28         |
| 2.5.1.1 Počáteční a okrajové podmínky transportu vlhkosti . . . . .                                 | 29         |
| 2.5.2 Transport tepla . . . . .   | 30         |
| 2.5.2.1 Počáteční a okrajové podmínky transportu tepla . . . . .                                    | 31         |
| 2.5.3 Transport mísitelné látky . . . . .   | 31         |
| 2.5.3.1 Hydrodynamická disperze . . . . .   | 31         |
| 2.5.3.2 Počáteční a okrajové podmínky transportu mísitelné látky . . . . .                          | 32         |
| 2.5.4 Sdružení transportních procesů . . . . .  | 33         |
| <b>3 Numerické řešení</b>   | <b>36</b>  |
| 3.1 Metoda konečných prvků . . . . .  | 36         |
| 3.2 Aplikace metody konečných prvků na řídicí rovnice v modelu DRUtES . . . . .                     | 42         |
| <b>4 Implementace</b>   | <b>45</b>  |
| <b>5 Kontrola modelu</b>  | <b>47</b>  |
| 5.1 Kontrola toku vlhkosti . . . . .  | 47         |
| 5.1.1 Philipsovo řešení Richardsovy rovnice . . . . .   | 48         |
| 5.1.2 Srovnání Philipsova a numerického řešení . . . . .  | 51         |
| 5.2 Kontrola toku tepla . . . . .   | 53         |

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| 5.3      | Kontrola toku mísitelné látky . . . . .                  | 58        |
| 5.4      | Kontrola sdruženého modelu . . . . .                     | 60        |
| <b>6</b> | <b>Diskuse</b>   | <b>65</b> |
| <b>7</b> | <b>Závěr</b>   | <b>67</b> |
|          | <b>Literatura</b>  | <b>71</b> |
| <b>A</b> | <b>Appendix</b>  | <b>72</b> |
| A.1      | Slabá forma Richarsovy rovnice . . . . .                 | 72        |
| A.2      | Slabá forma rovnice proudění tepla . . . . .             | 74        |
| A.3      | Slabá forma rovnice transportu mísitelné látky . . . . . | 74        |
| A.4      | Tabulkové hodnoty aktivity vybraných roztoků . . . . .   | 75        |
| A.5      | Funkční předpisy vybraných parametrů . . . . .           | 75        |
| A.6      | Ukázka výpočetní sítě a řešení teploty . . . . .         | 76        |

# Seznam zkratek

|               |   |    |
|---------------|---|----|
| $n$           | pórovitost $[-]$ .....  | 4  |
| $V_p$         | objem pórů ve vzorku $[L^3]$ .....  | 4  |
| $V_T$         | celkový objem vzorku $[L^3]$ .....  | 4  |
| $V_l$         | objem vody ve vzorku $[L^3]$ .....  | 4  |
| $V_g$         | objem půdního vzduchu ve vzorku $[L^3]$ .....                                     | 4  |
| $\theta$      | objemová vlhkost $[L^3.L^{-3}]$ .....   | 4  |
| $a$           | objemové zastoupení půdního vzduchu $[L^3.L^{-3}]$ .....                          | 4  |
| $\theta_s$    | saturovaná objemová vlhkosti $[L^3.L^{-3}]$ .....                                 | 4  |
| $\theta_r$    | reziduální objemová vlhkosti $[L^3.L^{-3}]$ .....                                 | 4  |
| $\theta_e$    | efektivní objemová vlhkost $[-]$ .....  | 5  |
| $h$           | hydraulická výška $[L]$ .....   | 5  |
| $\Psi$        | celkový potenciál $[L^2.t^{-2}]$ .....  | 5  |
| $\psi_\pi$    | osmotický potenciál $[L^2.t^{-1}]$ .....  | 6  |
| $\alpha$      | parametr van Genuchtenovy retenční křivky $[L^{-1}]/[t^2.L^{-2}]$ .....           | 7  |
| $n$           | parametr van Genuchtenovy retenční křivky $[-]$ .....                             | 7  |
| $m$           | parametr van Genuchtenovy retenční křivky $[-]$ .....                             | 7  |
| $T$           | teplota $[K]$ .....   | 7  |
| $K_s$         | nasyčená hydraulická vodivost $[L.t^{-1}]/[M.t.L^{-3}]$ .....                     | 10 |
| $q$           | vektor toku kapaliny por. prostředím $[L.t^{-1}]/[M.L^{-2}.t^{-1}]$ .....         | 10 |
| $K$           | nenasyčená hydraulická vodivost $[L.t^{-1}]/[M.t.L^{-3}]$ .....                   | 10 |
| $\lambda$     | charakteristická délka .....  | 11 |
| $\nu$         | kinematická viskozita $[L^2.t^{-1}]$ .....  | 11 |
| $T_{ref}$     | referenční teplota $[K]$ .....  | 12 |
| $K_{T_{ref}}$ | nenasyčená hydraulická vodivost při referenční teplotě $[L^2/t]$ .....            | 12 |
| $\sigma$      | povrchové napětí $[M.t^{-2}]$ .....   | 12 |
| $STVF$        | <i>surface-tension viscous-flow</i> model .....                                   | 12 |
| $G_K(h)$      | funkce <i>gain</i> faktor modelu pro hydraulickou vodivost .....                  | 13 |
| $G_\Psi(h)$   | funkce <i>gain</i> faktor modelu pro potenciál .....                              | 13 |
| $\mu$         | dynamická viskozita $[M.L^{-1}.t^{-1}]$ .....                                     | 15 |
| $c$           | koncentrace $[M.M^{-1}]$ .....  | 15 |
| $R$           | univerzální plynová konstanta $[L^2.t^{-1}]$ .....                                | 19 |
| $M_w$         | molekulární hmotnost vody $[M.mol^{-1}]$ .....                                    | 19 |
| $\bar{a}$     | aktivita roztoku vody $[-]$ .....   | 20 |
| $\gamma$      | koeficient osmotického potenciálu $[-]$ .....                                     | 21 |
| $r_s$         | poloměr molekul rozpuštěné látky $[L]$ .....                                      | 21 |
| $r_w$         | poloměr molekul vody $[L]$ .....  | 21 |
| $b$           | půlka tloušťky filmu vody na částech půdy $[L]$ .....                             | 21 |
| $K_{\Psi l}$  | vodivost vlivu potenciálu na tok kapalné fáze $[M.t.L^{-3}]$ .....                | 22 |
| $K_{Tl}$      | vodivost vlivu teploty na tok kapalné fáze $[M.L^{-1}.T^{-1}.t^{-1}]$ .....       | 22 |
| $K_{cl}$      | vodivost vlivu koncentrace na tok kapalné fáze $[M^2.L^{-1}.M^{-1}.t^{-1}]$ ..... | 22 |
| $D_A$         | molekulární difuzivita vodní pády ve vzduchu $[L^2.t^{-1}]$ .....                 | 23 |



|               |   |    |
|---------------|---|----|
| $\rho_v$      | hustota vodních par [ $M.L^{-3}$ ] .....  | 23 |
| $\rho_s$      | hustota plně nasycených vodních par [ $M.L^{-3}$ ] .....                        | 24 |
| $K_{\Psi v}$  | vodivost vlivu potenciálu na tok plynné fáze [ $M.t.L^{-1}$ ] .....             | 25 |
| $K_{Tv}$      | vodivost vlivu teploty na tok plynné fáze [ $M.L^{-1}.T^{-1}.t^{-1}$ ] .....    | 25 |
| $K_{cv}$      | vodivost vlivu koncentrace na tok plynné fáze [ $M^2.L^{-1}.M^{-1}.t^{-1}$ ] .. | 25 |
| $T_{\circ C}$ | teplota ve stupních Celsia [ $T$ ] .....  | 26 |
| $c_{mol}$     | koncentrace v $mol.kg^{-1}$ [ $mol.M^{-1}$ ] .....                              | 26 |
| $t$           | čas [ $t$ ] .....   | 28 |
| $S_s$         | specifická storativita [ $t^2.L^{-2}$ ] .....                                   | 28 |
| $C(\Psi)$     | vodní kapacita [ $t^2.L^{-2}$ ] .....   | 28 |
| $C_s$         | objemová tepelná kapacita pevné fáze [ $M.t^{-2}.L^{-1}.T^{-1}$ ] .....         | 30 |
| $\lambda^*$   | tepelná vodivost porézního prostředí [ $M.L.t^{-3}.T^{-1}$ ] .....              | 30 |
| $L_w$         | latentní teplo spotřebované při vypařování [ $L^2.t^{-2}$ ] .....               | 30 |
| $C_l$         | specifické teplo půdní vody [ $L^2.t^{-2}.T^{-1}$ ] .....                       | 30 |
| $D$           | Hydrodynamická disperze [ $L^2.t^{-1}$ ] .....                                  | 31 |
| $Pe$          | Pécletovo číslo .....   | 32 |
| $D_0$         | difuzní koeficient rozpuštěné látky v kapalině [ $L^2.t^{-1}$ ] .....           | 32 |
| $\kappa$      | disperzivita [ $L$ ] .....  | 32 |
| NS            | Nash-Sutcliffe koeficient $[-]$ .....   | 52 |
| RMSE          | odmocnina sumy čtverců chyb [ $L$ ] .....                                       | 52 |

# Kapitola 1

## Úvod

Nenasycená zóna půdního profilu je část hydrologického cyklu, kde dochází k výměně hmoty a energie mezi atmosférou a podzemní vodou. Většinou to také bývá část půdního profilu, kde se vyskytují kořeny rostlin, odkud čerpají půdní vláhu a živiny obsažené v půdě. Je to komplexní systém, kde dochází k perkolaci vody směrem k hladině podzemní vody či k transportu vody opačným směrem díky evapotranspiraci. Směr takového proudění závisí na energetické bilanci v daném okamžiku. Distribuce teploty (energetického stavu) se rovněž podílí na transportu půdní vláhy ve vertikálním směru. Přítomnost mísitelných látek (například určitých solí) v půdě může mít negativní vliv na úrodnost pole. V případě ekologické havárie může mít uniklý kontaminant vliv na životní prostředí v dané oblasti po relativně dlouhou dobu. Doba, po jakou se daná látka udrží v této oblasti je jistě předmětem zajmu.

Tyto děje, jako transport vody, teploty a koncentrace mísitelné látky, se navzájem ovlivňují. V takovém případě lze použít sdružený model, kde je určitým způsobem mezi těmito procesy vytvořen vztah. Pohledem této práce je model diferenciální rovnice, která je sdružená pomocí členů, které reprezentují významný vliv jednoho procesu na jiný.

Náplní této práce bylo použít takto sdružený model publikovaný v článkách Nonorio et al. (1996a) a Nonorio et al. (1996b) a implementovat jej do modelu DRU $\tau$ ES, který vytvořil vedoucí této práce doc. Ing. Michal Kuráž, Ph.D. v rámci své disertační práce (Kuráž, 2011). Noborioho články (Nonorio et al., 1996a,b) jsou

jakousi metodikou a jsou v textu mnohokrát citovány.

Noboriho model je složen ze tří sdružených parciálních diferenciálních rovnic, jejichž koeficienty mají určitý fyzikální význam. V 2. kapitole této práce jsem se pokusil tento význam vysvětlit. V první části této kapitoly je nadefinováno porézní prostředí a jeho retenční vlastnost, Darcy-Buckinghamův zákon a model nenasycené hydraulické vodivosti. Dále je v této kapitole popsán absolutní a gradientní vliv teploty a koncentrace mísitelné látky na nenasycenou hydraulickou vodivost. Nakonec jsem ukázal řídicí rovnice a jejich okrajové podmínky. V 3. kapitole jsem spíše intuitivně vysvětlil Galerkinovu metodu konečných prvků a především jsem zde ukázal její aplikaci na řídicí rovnice řešeného modelu. V další kapitole jsem popsal adresářovou strukturu modelu a soubory, které jsem v průběhu práce vytvářel či modifikoval. V rámci závěrečné 5. kapitoly jsem provedl kontrolu implementace Nohoriho modelu do modelu DRU $\tau$ ES. Provedl jsem v ní porovnání numerického řešení se známým analytickým řešením daných rovnic a popsal několik testovacích běhů modelu u sdruženého problému.

## 1.1 Metodika

Při vytváření modelu bylo nejprve třeba identifikovat členy řídicích rovnic a upravit je pomocí metody konečných prvků. Tento postup je popsán v podkapitole 3.2 a v apendixu A.1, A.2 a A.3. Dále pak zapsat do kódu konstituční vztahy a jejich parametry, které jsem pak napojil na výpočetní část modlu DRU $\tau$ ES. Tyto konstituční vztahy jsem ukázal především v kapitole 2.4. Správnost vytvořeného modelu jsem následně zkontroloval. To jsem popsal v kapitole 5.

# Kapitola 2

## Teorie

V této kapitole bych rád vysvětlil děje, které ovlivňují proudění kapalin v nenasycené zóně půdního prostředí a popsal je matematicky tak, jak byly implementovány do modelu DRU $\tau$ ES. Jedná se tedy o popis modelu. Teorie, která se týká proudění kapalin a plynů nenasycenou zónou, byla vyvinuta převážně v první polovině 20. století, přestože teorie fundamentálnější fyziky, z které vztahy vycházejí, je samozřejmě starší. V první části této kapitoly jsem prošel základní charakteristiky popisující půdní prostředí. Z hlediska sdružených transportních dějů v porézním prostředí je podstatná definice celkového a dílčích potenciálů, které řídí transport vlhkosti. Rovněž jsou v této kapitole uvedeny modely retenčních čar a hydraulických vodivostí tak, jak byly v modelu DRU $\tau$ ES implementovány. Dále je zde odvozen jak absolutní vliv teploty a koncentrace kontaminantu na hydraulické vlastnosti prostředí, tak vliv koncentračních i teplotních gradientů na celkový tok řešených procesů. Na konci kapitoly jsou ukázány a vysvětleny řídicí rovnice řešených problémů a stručně vysvětlen koncept sdružených transportních procesů i jejich diskretizace pomocí metody konečných prvků, která byla v modelu DRU $\tau$ ES již implementována.

### 2.1 Porézní prostředí a nenasycená zóna

Porézní prostředí je materiál tvořený shlukem více či méně chaoticky uspořádaných půdních agregátů a prázdných (mezi-agregátových) prostor, pórů. Jedná se o půdní

prostředí. Poměrné zastoupení pórů v daném prostředí se vyjadřuje pórovitostí  $n$  [–] definovanou jako poměr objemu pórů  $V_p$  [ $L^3$ ] k objemu daného půdního vzorku  $V_T$  [ $L^3$ ],

$$n = \frac{V_p}{V_T}.$$

Pokud se dané prostředí začne plnit nějakou kapalinou, zavádí se tzv. objemová vlhkost  $\theta$  [ $L^3.L^{-3}$ ], která vyjadřuje poměr objemu půdy, který obsahuje kapalinu,  $V_l$  [ $L^3$ ] k celkovému objemu vzorku  $V_T$  (Kutílek et al., 2004),

$$\theta = \frac{V_l}{V_T}.$$

Zároveň s plněním vzorku kapalinou ubývá ve vzorku prostor, kde se vyskytuje půdní vzduch. Obsah půdního vzduchu  $a$  [ $L^3.L^{-3}$ ] je vyjádřen jako poměr objemu vzduchu  $V_g$  [ $L^3$ ] k celkovému objemu vzorku  $V_T$  [ $L^3$ ] (Warrick, 2001),

$$a = \frac{V_g}{V_T}.$$

Přesto, že objemová vlhkost je běžně definována jako objem kapalné fáze k objemu vzorku, musíme ji z pohledu této práce chápat jako sumu objemové vlhkosti kapalné fáze a objemové vlhkosti vodních par v půdě. Tedy jakési

$$\theta = \theta_l + \theta_v.$$

V Nonorio et al. (1996a) je totiž počítána Richardsova rovnice s vlivem kapalně i plynné fáze v jedné rovnici. Proto budu v této práci mluvit o transportu vlhkosti, kterým je tedy transport kapalně i plynné fáze vody v půdě.

Dále je definována saturovaná objemová vlhkost  $\theta_s$  [ $L^3.L^{-3}$ ] a reziduální objemová vlhkost  $\theta_r$  [ $L^3.L^{-3}$ ], kde saturovaná objemová vlhkost je vlhkost při úplném nasycení prostředí. Reziduální objemová vlhkost je vlhkost, která v půdním vzorku zůstává i po odvodnění, je v půdě uzavřená. Objemová vlhkost může být pomocí saturované objemové vlhkosti a reziduální objemové vlhkosti normalizována na interval od nuly k jedné, na takzvanou efektivní objemovou vlhkost  $\theta_e$  (Kutílek

et al., 2004),

$$\theta_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}.$$

Půdní prostředí, pokud je nenasycené, je složeno ze tří složek: půdy, vody a půdního vzduchu (obvykle s velkým obsahem vodních par). Půdní voda je v tomto konceptu smáčivá fáze a půdní plyn nesmáčivá. Voda při plnění přilne k částicám půdy a vytlačí od nich půdní plyn. Voda poté zabírá menší póry a půdní plyn větší (Warrick, 2001).

V tomto modelu není transport vodních par v půdním vzduchu explicitně počítán samostatnou rovnicí, přesto je efekt tohoto transportu do modelu zahrnut jako přírůstek či úbytek k difuzním a advekčním členům rovnic (viz. dále).

## 2.2 Potenciál půdního prostředí

Popsat celkový potenciál v půdním prostředí je obtížné. Jedná se totiž o sumu dílčích potenciálů. Podle typu úlohy můžeme uvažovat pouze vybrané potenciály, které významně ovlivňují celkový potenciál v dané úloze. Pro modelování proudění čisté vody půdním prostředím obvykle postačí potenciál matrice, často značený jako tlaková výška, a gravitační potenciál. Tlaková výška v nenasycené zóně pak vyjadřuje práci, která musí být vykonána půdním prostředím, aby se infinitezimální kvantita vody dostala do určité výšky nad volnou hladinu (Baver et al., 1972). Potenciál se tedy v nenasycené zóně udává se záporným znaménkem, které vyjadřuje odevzdanou práci. V tomto případě je celkový potenciál

$$\Psi = h + z,$$

kde  $\Psi$  je celkový potenciál,  $h$  hydraulická výška a  $z$  gravitační potenciál, tedy výška od dané referenční hladiny (postavení referenční hladiny určuje znaménko tohoto potenciálu). Dimenzi potenciálů jsem záměrně vynechal. Stručně ji popíšu dále v textu.

V případě tohoto modelu je zahrnut i transport mísitelné látky. V tomto případě je vhodné do celkového potenciálu zahrnout i osmotický potenciál  $\psi_\pi$ .

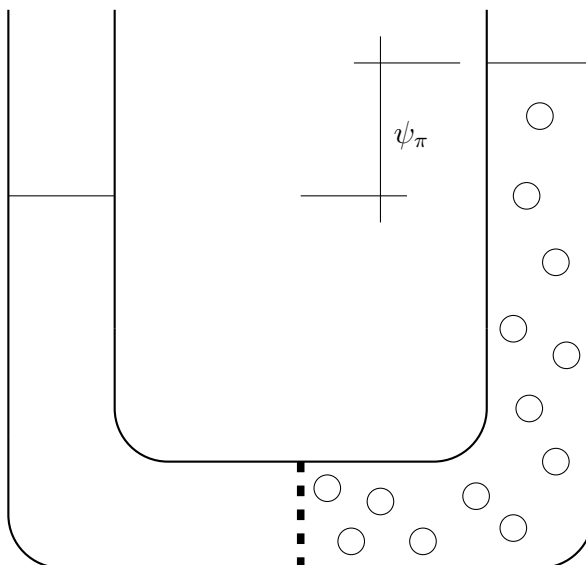
Celkový potenciál  $\Psi$  pak bude (Baver et al., 1972)

$$\Psi = h + \psi_{\pi} + z.$$

Osmotický potenciál v roztoku s vodou je způsoben bipolárním charakterem molekul vody, který vyvolává přitahování vody rozpuštěnými ionty určité látky. Další podmínkou vzniku osmotického potenciálu je přítomnost polopropustné membrány. Póry membrány jsou natolik velké, že jimi může procházet molekula vody, molekula rozpuštěné látky či molekula vody ve vazbě s danou látkou již nikoli. Tento princip lze ukázat na pokusu, kde jsou dvě spojené nádoby rozdělené polopropustnou membránou a kde je do jednoho ramene takto spojených nádob přidána látka, která se ve vodě rozpouští. Voda je přitahována molekulami rozpuštěné látky, která ale nemůže procházet membránou. To způsobí zvýšení hladiny v rameni nádoby s rozpuštěnou látkou. Na obrázku 2.1 je tento děj znázorněn. Zvyšování hladiny zastaví až tíha kapaliny. Rozdíl hladin je pak osmotický potenciál  $\psi_{\pi}$ . Osmotický tlak tedy v tomto případě způsobuje pohyb kapaliny proti směru gravitačního potenciálu. Čistá kapalina by se pohybovala ve směru svého gravitačního potenciálu. Jinými slovy, kapalina nesoucí rozpuštěnou látku se pohybuje z oblasti své vyšší koncentrace od oblasti s nižší, z pohledu rozpuštěné látky se pohybuje voda z oblasti s nižší koncentrací do oblasti s vyšší. Podle toho, jestli se na děj díváme z hlediska rozpuštěné látky či vody, volíme znaménko před osmotickým gradientem. Pokud by byla membrána propustná pro molekuly kapaliny stejně jako pro molekuly rozpuštěné látky, osmotický tlak by se neměl jak projevit, osmotický potenciál by nevznikal a hladina kapaliny by v obou ramenech trubice na obrázku 2.1 byla ve stejné výši (Baver et al., 1972).

Porézní prostředí tedy můžeme uvažovat jako jakousi tří-rozměrnou membránu, kde působí osmotický tlak takto popsaným způsobem. Jak přesně je osmotický tlak implementován do modelu DRU<sub>t</sub>ES jsem popsal v podkapitole 2.4.2.

Rád bych se zde krátce zmínil o jednotkách půdního potenciálu. Potenciální energie může být vyjádřena jako energie vztažená k hmotě v jednotkách joule na kilogram. Potenciál má pak dimenzi  $L^2 \cdot t^{-2}$ . Pro vyjádření potenciálu se často používá dimenze délky  $L$ , kterou získáme vydělením potenciálu v energetických



Obrázek 2.1: Spojité nádoby s membránou

jednotkách gravitačním zrychlením. Vynásobením potenciálu v energetických jednotkách hustotou vody získáme celkový potenciál v  $Pa$ . Má tedy dimenzi  $M.L.t^{-2}$ . V modelu Nonorio et al. (1996a) je potenciál vyjádřen dimenzí energie  $L^2.t^{-2}$ .

## 2.3 Retenční charakteristika porézního prostředí

Retenční charakteristiku prostředí vyjadřuje retenční křivka (např.: (Kutílek et al., 2004)). Tato křivka vyjadřuje vztah mezi potenciálem a objemovou vlhkostí. Jinak řečeno vyjadřuje, jakou práci vykoná porézní prostředí za dané vlhkosti, aby se voda udržela na určité hladině nad volnou hladinu (Baver et al., 1972). Retenční křivky je třeba zjistit pro danou půdu měřením. Existují parametrizované vztahy retenčních křivek. Jedním z nejpoužívanějších je křivka dle van Genuchten (1980),

$$\theta(h) = \begin{cases} \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + (\alpha|h|)^n)^m} & \text{pro } h < 0 \\ \theta_s & \text{pro } h \geq 0 \end{cases} \quad (2.1)$$

kde  $\alpha$ ,  $n$  a  $m$  jsou empirické parametry. Parametr  $\alpha$  udává pozici inflexního bodu křivky a jeho převrácená hodnota udává vstupní hodnotu vzduchu. Parametr  $n$  udává prudkost klesání retenční křivky od  $\theta_s$  (Wösten & van Genuchten, 1988).



Parametr  $m$  ovlivňuje zakřivení křivky v oblasti kde se, pro nižší (více záporné) tlakové výšky, začne blížit reziduální objemové vlhkosti. Přitom  $m$  lze odvozovat zvlášť, či je možné jej zapsat ve vztahu k  $n$  jako  $m = 1 - 1/n$  pro  $n \in (1.25, 6)$  (van Genuchten & Nielsen, 1985).

Další způsob, jak lze retenční čáru odvodit, je například podle Huston & Cass (1987). Tato parametrizace retenční křivky obsahuje čtyři parametry a je tvořena dvěma funkcemi. Exponenciální funkcí (v podstatě se jedná o funkci Brooks a Corey) a funkcí parabolickou. Úpravami blíže popsány v článku Huston & Cass (1987) je určen předpis pro inflexní bod,

$$\theta_i = \frac{2b\theta_s}{1 + 2b},$$

kde jsou funkce „spojeny“ a následně funkce samotné

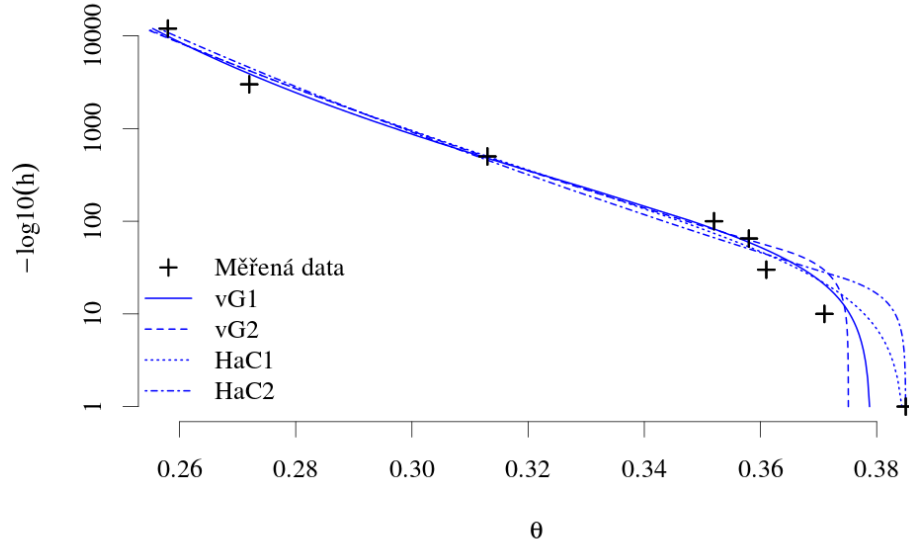
$$\theta(h) = \begin{cases} \theta_s \left(\frac{h}{a}\right)^{-1/b} & \theta < \theta_i \\ \theta_s - \frac{\theta_s h^2 (1 - \theta_i / \theta_s)}{a^2 (\theta_i / \theta_s)^{-2b}} & \theta \geq \theta_i. \end{cases} \quad (2.2)$$

Výsledná funkce je tedy křivka sigmoidálního tvaru, podobně jako funkce křivky (2.1).

Na obrázku 2.2 jsou ukázány křivky (2.1) a (2.2) prokládající data<sup>1</sup>. U křivek označených indexem 1 byly hledány všechny parametry, u křivek označených indexem 2 byla napevno zadána saturovaná objemová vlhkosti.

Retenční čáry (2.1) a (2.2) jsou implementovány do kódu DRU $\tau$ ES. Křivka van Genuchten (1980) především pro její rozšířenost a pro její konotace na nenasycenou hydraulickou vodivost (viz. níže). Křivka dle Huston & Cass (1987) je implementovaná do modelu Nonorio et al. (1996a) a Nonorio et al. (1996b), proto ji lze v modelu DRU $\tau$ ES zvolit při zadávání vstupních dat. Výhodou retenční křivky dle Huston & Cass (1987) by mohlo být, že k její parametrizaci je nutno odvodit o jeden parametr méně než u křivky van Genuchten (1980). Pokud parametr  $m$  rovnice (2.1) určíme jako  $1 - 1/n$ , výhoda křivky dle (2.2) již není relevantní.

<sup>1</sup>K proložení dat jsem použil nelineární metodu nejmenším čtvercům v balíčku R.



**Obrázek 2.2:** Retenční čáry: vG1, vG2 - retenční čára dle van Genuchtena; HaC1, HaC2 - retenční čára dle Huston a Casse

## 2.4 Tok vlhkosti půdním prostředím

V této části jsem popsal nenasycenou hydraulickou vodivost a její závislost na teplotě a koncentraci mísitelné látky. Následně pak konstituční vztahy vyjadřující vliv teplotního a koncentračního gradientu na transport kapalné i plynné fáze v porézním prostředí.

### 2.4.1 Darcyho zákon a hydraulická vodivost

Hydraulická vodivost ovlivňuje tok dané kapaliny určitým porézním prostředím. Nasycená hydraulická vodivost vyjadřuje rychlost proudění prostředím při jednotkovém hydraulickém gradientu. To vychází z Darcyho zákona původně popsaném v (Darcy, 1856). Darcy odvodil, že existuje lineární závislost mezi rychlostí toku kapaliny a gradientem měřených tlaků v různých částech pokusné kolony. Směrnicí této lineární závislosti je kýžená nasycená hydraulická vodivost. Obecně je Darcyho zákon

$$\mathbf{q} = -K_s \nabla \Psi, \quad \text{kde } \Psi = h + z. \quad (2.3)$$

Pokud je vzdálenost referenční hladiny  $z = 0$ , gradient hydraulické výšky  $h$  je  $\nabla h = 1$  a celkový potenciál  $\Psi$  se tedy rovněž rovná jedné, je tok  $\mathbf{q}$  [ $L.t^{-1}$ ] roven nasycené hydraulické vodivosti  $K_s$  [ $L.t^{-1}$ ].

V nenasyceném prostředí již není objemová vlhkost rovna saturované a potenciál může jít do záporných hodnot (jak je popsáno v předešlé sekci). Tok v nenasycené zóně popsal Edgar Buckingham. Darcy-Buckinghamův zákon, který je Buckinghamovým rozšířením Darcyho zákona, lze zapsat

$$\mathbf{q} = -K(\Psi)\nabla\Psi,$$

kde  $K(\Psi)$  je nenasycená hydraulická vodivost. Detailnější popis Darcyho a Darcy-Buckinghamova zákona a jejich platností lze nalézt v mé bakalářské práci (Jeřábek, 2012).

Nenasycená hydraulická vodivost  $K$  vyjadřuje v podstatě totéž, co nasycená, má i stejnou dimenzi [ $L.t^{-1}$ ]. Rozdíl je v prostředí, kde se uplatňuje. Nenasycená hydraulická vodivost se obvykle popisuje funkcí závislou na objemové vlhkosti  $\theta$  či na potenciálu  $\Psi$ . Je to funkce sigmoidálního tvaru začínající v  $K_s$  pro  $\Psi = 0$  či  $\theta = \theta_s$ . Jak se prostředí začne odvodňovat, na uvolnění dané kapaliny v porézním prostředí je třeba vykonat stále větší práci. To způsobuje zpravidla prudký pokles nenasycené hydraulické vodivosti. Darcy-Buckinghamův zákon je již vztahem nelineárním. Tvar křivky je závislý na půdním typu a tekutině, která se prostředím pohybuje.

Nenasycenou hydraulickou vodivost lze vyjádřit pomocí relativní hydraulické vodivosti  $K_r$ . Za předpokladu platnosti kapilárního modelu takový vztah odvodil Mualem (1976),

$$K_r(\theta) = \theta_e^l \left( \frac{\int_0^\theta \frac{1}{h(\theta)} d\theta}{\int_0^{\theta_s} \frac{1}{h(\theta)} d\theta} \right), \quad (2.4)$$

kde  $l$  je empirický parametr (dle Mualem (1976) roven 0.5, což je potvrzeno například v článku Wösten & van Genuchten (1988)).

Parametrizovaný vztah pro relativní hydraulickou vodivost získal van Genuchten (1980) substitucí rovnice (2.1) do rovnice (2.4). Tento vztah pak vypadá

následovně:

$$K_r(h) = \frac{1 - (\alpha h)^{mn}(1 + (\alpha h)^n)^{-m}}{(1 + (\alpha h)^n)^{m/2}}. \quad (2.5)$$

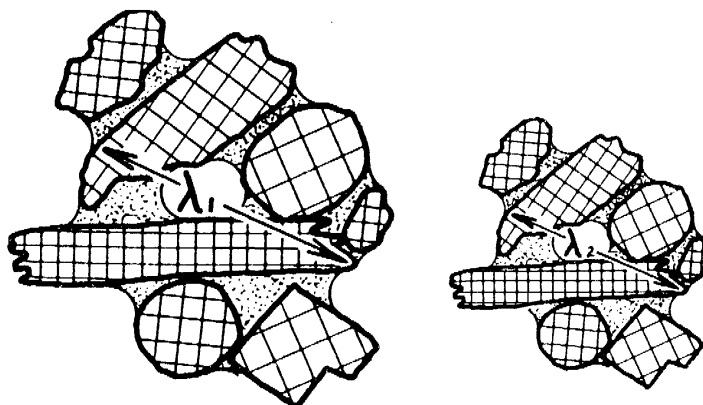
Z relativní hydraulické vodivosti a z nasycené hydraulické vodivosti lze pak jednoduše odvodit nenasyčenou hydraulickou vodivost

$$K(h) = K_r(h)K_s. \quad (2.6)$$

Pochopitelně existují i další modely nenasyčené hydraulické vodivosti. V modelu DRUtes je však implementován jen tento, proto se dalším modely nebudu v práci zabývat.

#### 2.4.1.1 Vliv teploty na nenasyčenou hydraulickou vodivost

Vliv teploty na nenasyčenou hydraulickou vodivost lze zavést například použitím principu podobnosti prostředí. Miller & Miller (1956) se i tímto fenoménem ve své studii zabývali. Jedná se o princip, kde, pokud jsou podobná, mohou se charakteristiky dvou prostředí navzájem odvozovat za použití tzv. měřítkového faktoru. Na obrázku 2.3 vidíme dvě podobná prostředí v podobném stavu, která se liší pouze charakteristickou délkou  $\lambda$ , která hraje roli měřítkového faktoru.



**Obrázek 2.3:** Ukázka dvou prostředí lišící se charakteristickou délkou  $\lambda$  (Miller & Miller, 1956)

Dále pak říkají, že existují systémové parametry, které mohou sloužit jako charakteristická vlastnost a hrají poté roli měřítkového faktoru. U hydraulické vodivosti je vlastnost, která vyjadřuje podobnost, viskozita  $\nu$  (Miller & Miller, 1956). Kinematická viskozita se s teplotou mění. Díky tomu lze zapsat vliv teploty

na hydraulickou vodivost jako (Giakoumakis & Tsakiris, 1991)

$$K_T(h)\nu(T) = K_{T_{ref}}(h)\nu(T_{ref}) = K^*(h),$$

kde  $T_{ref}$  je referenční teplota  $[K]$ ,  $K_{T_{ref}}(h)$  hydraulická vodivost při referenční teplotě  $[L.t^{-1}]$ ,  $\nu(T_{ref})$  viskozita kapaliny při referenční teplotě  $[L^2.t^{-1}]$ .  $K^*(h)$  je normalizovaná hydraulická vodivost již na teplotě nezávislá.  $K_T(h)$  a  $\nu(T)$  je hydraulická vodivost a kinematická viskozita při požadované teplotě  $T$ . Pokud tedy chceme odvodit nenasycenou hydraulickou vodivost při teplotě  $T$ , využijeme normalizovanou hydraulickou vodivost a hodnotu viskozity za dané teploty  $\nu(T)$ , tedy

$$K_T(h) = \frac{K_{T_{ref}}(h)\nu(T_{ref})}{\nu(T)} = \frac{K^*(h)}{\nu(T)}.$$

V publikaci de Silans et al. (1989) je odvozen vliv teploty z nasycené hydraulické vodivosti, která se poté dosadí do rovnice (2.6).

Tento přístup lze obdobně použít k odvození vlivu teploty na retenční čáru. Jako charakteristická vlastnost je ale místo kinematické viskozity použito povrchové napětí  $\sigma$ . Vliv povrchového napětí na retenci vody je z pohledu vlivu viskozity na hydraulickou vodivost převrácený (Miller & Miller, 1956). Samotný postup bude obdobný jako u předchozího případu. Mějme tedy

$$\frac{\theta_T(h)}{\sigma(T)} = \frac{\theta_{T_{ref}}(h)}{\sigma(T_{ref})} = \theta^*(h),$$

odkud následně odvodíme  $\theta_T(h)$  při požadované teplotě

$$\theta_T(h) = \frac{\theta_{T_{ref}}(h)\sigma(T)}{\sigma(T_{ref})} = \theta^*(h)\sigma(T). \quad (2.7)$$

Výše popsaná metoda se v anglické literatuře nazývá *surface-tension, viscous-flow model*, (*STVF model*) (Giakoumakis & Tsakiris, 1991). Tedy model zahrnující povrchové napětí (*surface-tension*) a viskozitu toku (*viscous-flow*) jako hlavní děje vyjadřující vliv teploty na proudění vody nenasycenou zónou půdního prostředí. Tento model dobře funguje u hrubozrnných nestrukturních půd (Nimmoo & Miller, 1986).

Jiný model sloužící k vyjádření vlivu teploty na nenasycenou hydraulickou vodivost je tzv. *gain* faktor model. Poprvé byl prezentován v článku Nimmo & Miller (1986). Tento model rovněž zahrnuje princip charakteristické vlastnosti. V článku Nimmo & Miller (1986) je odvozen pro retenční křivku. V Noboriho modelu je zahrnut i do nenasycené hydraulické vodivosti podle Giakoumakis & Tsakiris (1991). Samotný *gain* faktor model nenasycené hydraulické vodivosti vypadá následovně:

$$G_K(h) = \frac{1 - K_{T_{ref2}}(h)/K_{T_{ref1}}(h)}{1 - \nu(T_{ref1})/\nu(T_{ref2})}, \quad (2.8)$$

kde  $G_K(h)$  je funkce *gain* faktoru, která je již na teplotě nezávislá. *STFV* model předpokládá, že je poměr  $K_{T_{ref2}}(h)/K_{T_{ref1}}(h)$  a  $\nu(T_{ref1})/\nu(T_{ref2})$  stejný, *gain* faktor model říká, že se poměr  $K_{T_{ref2}}(h)/K_{T_{ref1}}(h)$  a  $\nu(T_{ref1})/\nu(T_{ref2})$  liší a tuto odlišnost se snaží do odvození vlivu teploty na  $K$  zahrnout. K odvození je třeba znát dvě křivky nenasycené hydraulické vodivosti při dvou různých teplotách (Nimmo & Miller, 1986). K výpočtu samotného  $K$  při teplotě  $T$  pak platí vztah

$$K_T = K_{T_{ref1}}(h)(1 - G_K(h)(1 - \nu(T_{ref1})/\nu(T))). \quad (2.9)$$

Přitom platí, že pokud je  $G(h) = 1$ , odpovídá rovnice (2.9) rovnici (2.7).

Obdobně lze použít *gain* faktor model i pro retenční křivku a vliv povrchového napětí. Funkce *gain* faktor modelu potom vypadá analogicky s rovnicí (2.8), přitom se zohledňuje převrácený vliv povrchového napětí na retenci kapaliny. Funkce tedy vypadá následovně:

$$G_\Psi(h) = \frac{\theta_{T_{ref2}}(h)/\theta_{T_{ref1}}(h) - 1}{\sigma(T_{ref2})/\nu(T_{ref1}) - 1}. \quad (2.10)$$

Vliv teploty  $T$  na retenci kapaliny pak lze odvodit pomocí funkce  $G_\Psi(h)$  jako

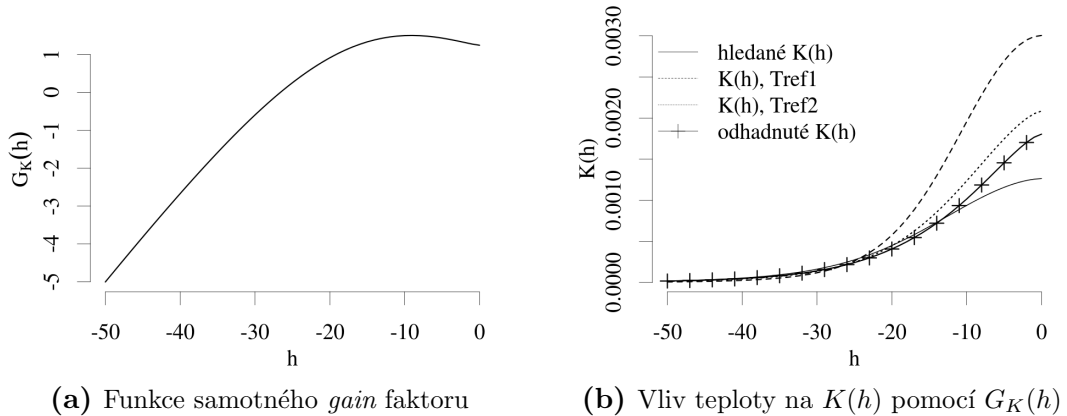
$$\theta_T(h) = \theta_{T_{ref1}}(h)(1 + G_\Psi(h)(\sigma(T)/\sigma(T_{ref1}) - 1)).$$

K ilustraci vlivu *gain* faktor modelu na nenasycenou hydraulickou vodivost jsem použil data z článku Giakoumakis & Tsakiris (1991). Data jsou ukázána v tabulce 2.1. Mějme měřená data s teplotou  $20^\circ\text{C}$  a  $8^\circ\text{C}$  a hledaný odhad  $K$

při teplotě  $3^\circ C$ . Průběhy nenasycených hydraulických vodivostí při těchto teplotách jsou zobrazeny na grafu 2.4b. Nenasycená hydraulická vodivost při teplotě  $3^\circ C$  je na grafu 2.4b rovněž odhalena, přestože je v tento okamžik neznámá. Jako první krok je třeba spočítat pomocí dvou referenčních teplot funkci  $G_K(h)$  dle rovnice (2.8). Průběh této funkce je ukázán na grafu 2.4a. Nyní již můžeme dopočítat upravenou nenasycenou hydraulickou vodivost pro teplotu  $3^\circ C$  dle rovnice (2.9) za použití referenční teploty  $T_{ref1}$ . Důležité při tomto postupu je volit  $T_{ref1}$  a  $T_{ref2}$  takové, že  $T_{ref1} > T_{ref2}$ . Pokud porovnáme měřenou a odhadnutou hodnotu nenasycené hydraulické vodivosti při teplotě  $3^\circ C$  vidíme, že jsou křivky poměrně rozdílné, přesto se odhad ke známé hodnotě přiblížil.

**Tabulka 2.1:** Data použita pro ilustraci *gain* faktor modelu Giakoumakis & Tsakiris (1991)

|                         | $\alpha [cm^{-1}]$ | $n [-]$ | $K_s [cm.h^{-1}]$ | $\theta_s [cm^3.cm^{-3}]$ | $\theta_r [cm^3.cm^{-3}]$ |
|-------------------------|--------------------|---------|-------------------|---------------------------|---------------------------|
| $T_{ref1} = 20^\circ C$ | 0.042              | 2.9     | 10.82             | 0.3                       | 0.06                      |
| $T_{ref2} = 8^\circ C$  | 0.037              | 2.47    | 7.51              | 0.3                       | 0.06                      |
| $T = 3^\circ C$         | 0.031              | 2.70    | 4.55              | 0.3                       | 0.06                      |



**Obrázek 2.4:** Ukázka *gain* faktor modelu

Obě varianty *gain* faktor modelu mohou být zjednodušeny jen na lineární závislost  $G_{K/\Psi} = ah + b$ , kde koeficienty  $a$  a  $b$  jsou odhadnuty z průběhu originálních funkcí (2.8) (ukázané na obrázku 2.4a) a (2.10). Místo funkce *gain* faktor modelu lze použít i konstantní hodnotu (Giakoumakis & Tsakiris, 1991).

Obě tyto varianty jsou v modelu zahrnuty. Přestože varianta *gain* faktor modelu ukazuje lepší výsledky (zejména v oblastech s menším nasycením), je velmi obtížné danou funkci  $G$  získat. Měření nenasycené hydraulické vodivosti je obecně časově velmi náročné. Měření nenasycené hydraulické vodivosti ve dvou teplotách o to více.

K vyjadřování nenasycených hydraulických vodivostí, ale i retenčních křivek, se mohou použít tzv. pedotransferové funkce. Pomocí nich lze přibližně určit potřebné půdní charakteristiky ze snadněji měřitelných půdních vlastností, jako je například půdní textura, obsah organické hmoty v půdě či hustota půdy. Pomocí vícenásobné lineární regrese po částech je pak možné odvodit vlhkosti pro dané hydraulické výšky či přímo určit koeficienty modelů hydraulických vodivostí pro určité půdní typy (Rawls et al., 1982). Obdobně lze použít techniky nelineární regrese k určení těchto parametrů (Saxton et al., 1986). Tyto funkce poté můžeme, například z citovaných článků, odvodit, nicméně pro účely odhadnutí vlivu teploty na retenční křivku i nenasycenou hydraulickou vodivost je třeba příslušná data doplnit o teplotu, při níž byla měřena. Nevýhodou může být, že takto odvozené křivky nebudou přesně odpovídat hodnotám ve specifické zájmové oblasti. Vzorčky půd použité při odvozování parametrů pedotransferových funkcí se mohou systematicky lišit dle lokalit, kde byly odebrány. Kompilace půd použitých v článku Rawls et al. (1982) jsou půdy Spojených států amerických, kde je vývoj půd ovlivněn jinými pedogenetickými faktory, proto se zjištěné parametry mohou systematicky lišit od těch odvozených z půd středoevropských.

Přestože viskozita ovlivňuje hydraulické vlastnosti v závislosti na teplotě, daná závislost nemusí vždy přesně platit. Constantz (1982) provedl pokus, při němž ukázal, že změna nenasycené hydraulické vodivosti je u většího nasycení řádově větší než hodnota odhadnutá pomocí změn ve viskozitě. To může například způsobovat rozdílná viskozita půdních vod ovlivněná jíly v půdě (Constantz, 1982), či vliv uzavřeného vzruchu.

#### **2.4.1.2 Vliv koncentrace mísitelné látky na nenasycenou hydraulickou vodivost**

Vliv koncentrace na křivku nenasycené hydraulické vodivosti je v tomto modelu proveden rovněž pomocí viskozity. Funkce viskozity, která je v modelu použita, je závislá na teplotě i koncentraci. Viskozita se se stoupající teplotou projevuje exponenciálním poklesem, se stoupající koncentrací lineárně. Funkce dynamické



viskozity  $\mu$  použité v modelu je funkce

$$\mu(T, c) = 0.01^{(-1.469+200.93/(T+116.71))} (1.0 + 9.359 \cdot 10^{-2}c + 9.320 \cdot 10^{-3}c^2), \quad (2.11)$$

kde  $c$  je koncentrace [ $M.M^{-1}$ ]. K získání kinematické viskozity je třeba vydělit  $\mu$  hustotou dané kapaliny. Kapalina je v tomto případě roztok nějaké ve vodě mísitelné látky. Je tedy třeba dělit hustotou daného roztoku. V modelu byla v rámci této práce mísitelná látka sůl  $NaCl$ . Hustota roztoku  $NaCl$  je funkce

$$\rho_l(T, c) = \rho_w(T) (1 + 3.956 \cdot 10^{-2}c - 1.154 \cdot 10^{-3}c^2), \quad (2.12)$$

kde  $\rho_w$  je hustota čisté vody závislá na teplotě, tedy,

$$\rho_w(T) = \left( 1.0 - \frac{(x - 3.9863)^2(T + 288.9414)}{(508929.2(T + 68.12963))} \right) \cdot 10^3. \quad (2.13)$$

Po vydělení rovnice (2.11) rovnicí (2.12) získáme vztah pro kinematickou viskozitu  $\nu(T, c) = \mu(T, c) / \rho_l(T, c)$ .

Tímto způsobem lze zahrnout vliv teploty a koncentrace mísitelné látky na hydraulickou vodivost. Jedná se o absolutní teploty a koncentrace. U sdružených procesů v půdním prostředí je transport vlhkosti ovlivněn rovněž teplotním a koncentračním gradientem. Vodivostní členy, které tento vliv vyjadřují, jsou popsány v další podkapitole.

Hydraulické vlastnosti půd jsou ovlivněny koncentrací mísitelných látek nejen vlivem změn viskozity. Na chemické složení kapaliny v půdním prostředí reagují především jíly obsažené v půdách. Částičky jílu se projevují s negativním nábojem (Bohn et al., 1985). Kationty přirozeně rozpuštěných solí v půdní vodě mají tendenci se na jílové částičky navazovat. Jedná se zejména o kationty  $Ca^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Na^+$  a  $K^+$ . Jejich zastoupení je v běžných půdách v uvedeném pořadí (Bohn et al., 1985). U běžných půd můžeme rovněž říci, že  $Ca^{2+}$  půdu stabilizuje a zvyšuje její hydraulickou vodivost, zatímco  $Na^+$  hydraulickou vodivost snižuje.  $Na^+$  má tendenci se dostat do dvojvrstvy jílových částiček a tím způsobit její bobtnání. Vlivem  $Na^+$  rovněž dochází k rozpadávání agregátů pudy a tyto odpadlé části ucpávají póry s menším průměrem. V půdě se pak mění rozdělení

velikosti pórů i její hustota a dochází ke snižování hydraulické vodivosti (McNeal & Coleman, 1966). Rozsah těchto objemových změn závisí na typu jílu vyskytující se půdě. Rovněž reversibilita této degradace závisí na typu jílu. U půd s velkým obsahem montmoriolitu se ukazuje, že reversibilita je po aplikaci  $Ca^{2+}$  největší, ne však úplná (McNeal & Coleman, 1966).

Stejně tak pH půdní vody může mít vliv na hydraulickou vodivost (Suarez et al., 1984). Pokles hydraulické vodivosti způsobený vyšším obsahem volných kationtů  $Na^+$  může být umocněn právě vyšším pH půdní vody, a to zejména v oblastech s aridním klimatem (Suarez et al., 1984).

Vlivy chemických látek popsaných v předchozích odstavcích však do modelu zahrnutý nejsou. Týkají se kontinuálních změn v půdě a probíhají spíše v dlouhodobějším časovém měřítku.

### 2.4.2 Vliv teplotního a koncentračního gradientu na proudění tekutin v porézním prostředí

Při transportu půdní vláhy s vlivem teplotního gradientu je nutno počítat rovněž s transportem vodních par. Jednak proto, že teplota je půdním vzduchem transportována, a rovněž proto, že teplo se spotřebovává při vypařování. S transportem půdních par je vhodné počítat například v úlohách, které zahrnují evapotranspiraci. Vlivem tepla na proudění vlhkosti v půdách se zabývali Philip & de Vries (1957), kteří odvodili difuzivitu pro vlhkostní i teplotní gradient s vlivem na transport vodních par a kapaliny. Tuto teorii použili a rozšířili Nassar & Horton (1989a) o vliv koncentrace mísitelné látky. Nassar & Horton (1989a) rovněž podpořili níže uvedená odvození experimentem ukazujícím pohyb vlhkosti a koncentrace rozpuštěné soli vlivem teplotního gradientu (Nassar & Horton, 1989b). V této části práce jsem odvodil příslušné vodivosti<sup>2</sup> vyjadřující vliv gradientu potenciálu, teplotního a koncentračního gradientu na tok vlhkosti porézním prostředím.

<sup>2</sup>V originálních člancích (Nassar & Horton, 1989b) a (Philip & de Vries, 1957) jsou tyto koeficienty odvozeny pro objemovou vlhkost a jsou nazývány difuzní. Model Nonorio et al. (1996a) řeší Richardsovu rovnici v kapacitním tvaru, kde jsou tyto koeficienty funkcí potenciálu. Proto jsou při tomto odvození rovnice upraveny pro funkční závislost na potenciálu a ne na objemové vlhkosti, jako je tomu v originálních člancích (Nassar & Horton, 1989b; Philip & de Vries, 1957)

Mějme tedy rovnice pro tok kapaliny a par (Nassar & Horton, 1989b; Philip & de Vries, 1957)

$$\mathbf{q}_l = -K_{\Psi l} \nabla \Psi - K_{Tl} \nabla T - K_{cl} \nabla c - Ki, \quad (2.14)$$

$$\mathbf{q}_v = -K_{\Psi v} \nabla \Psi - K_{Tv} \nabla T - K_{cv} \nabla c \quad (2.15)$$

a výslednou rovnicí pro tok vlhkosti,  $\mathbf{q}_w = \mathbf{q}_l + \mathbf{q}_v$ ,

$$\mathbf{q}_w = -(K_{\Psi l} + K_{\Psi v}) \nabla \Psi - (K_{Tl} + K_{Tv}) \nabla T - (K_{cl} + K_{cv}) \nabla c - Ki. \quad (2.16)$$

Všechny koeficienty jsou funkcí hydraulické výšky  $h$ . Významy jednotlivých vodivostí jsou pro přehlednost ukázány v tabulce 2.2. Člen  $K_{\Psi l}$  tedy vyjadřuje vliv gradientu tlakových výšek na tok kapalné fáze. Ostatní vodivosti v tabulce 2.2 mají analogický význam. Člen  $Ki$  v rovnici 2.14 a 2.16 vyjadřuje vliv gravitace,  $i$  je jednotkový vektor ve směru působení gravitačních sil.

**Tabulka 2.2:** Přehled vodivostí vstupujících do rovnic (2.14), (2.15) a (2.16)

|                                  | na tok<br>kapalné fáze | na tok<br>plynné fáze |
|----------------------------------|------------------------|-----------------------|
| vliv gradientu<br>tlakové výšky  | $K_{\Psi l}$           | $K_{\Psi v}$          |
| vliv<br>teplotního gradientu     | $K_{Tl}$               | $K_{Tv}$              |
| vliv<br>koncentračního gradientu | $K_{cl}$               | $K_{cv}$              |

Rovnice (2.16) tedy popisuje tok vlhkosti s vlivem teplotního a koncentračního gradientu. Dosazením rovnice (2.16) do rovnice kontinuity je odvozená příslušná parciální diferenciální rovnice pro výpočet transportu vlhkosti v půdním prostředí. V následujícím textu jsem vysvětlil vztahy vyjadřující jednotlivé vodivostní členy rovnic (2.14), (2.15) a (2.16) ukázané v tabulce 2.2. Vzhledem k relativně velkému počtu parametrů, které obsahují tyto vodivosti, jsem je popsal v průběhu odvození.

### 2.4.2.1 Tok kapalné fáze.

Začneme s rovnicí (2.14). Proudění kapaliny v nenasycené zóně porézního prostředí popisuje Darcy-Buckinghamův zákon vycházející z Darcyho rovnice (2.3). Pokud je v půdním prostředí přítomna mísitelná látka, je třeba do celkového potenciálu zahrnout potenciál osmotický (Baver et al., 1972)

$$\Psi = h + \psi_{\pi} + z. \quad (2.17)$$

Tlaková výška  $h$  i osmotický potenciál  $\psi_{\pi}$  jsou v tomto případě závislé na teplotě a koncentraci mísitelné látky<sup>3</sup>,  $h(T, c)$  a  $\psi_{\pi}(T, c)$ . Po derivaci vypadá rozepsaný celkový potenciál (2.17)

$$\nabla\Psi = \nabla h + \frac{dh}{dT}\nabla T + \frac{dh}{dc}\nabla c + \frac{d\psi_{\pi}}{dT}\nabla T + \frac{d\psi_{\pi}}{dc}\nabla c + 1. \quad (2.18)$$

První člen na pravé straně je gradient tlakové výšky. V druhém členu na pravé straně lze vyjádřit  $\frac{dh}{dT}$  pomocí kapilarity, kde je výška kapilárního vztlínání  $h$  přímo úměrná povrchovému napětí  $\sigma$  a nepřímo úměrná poloměru póru  $r$ , tedy  $h = 2\sigma/r$  (Philip & de Vries, 1957). Jak již bylo ukázáno výše, povrchové napětí je funkce teploty a koncentrace.  $\frac{dh}{dT}$  a třetí člen na levé straně rovnice (2.18)  $\frac{dh}{dc}$  je tedy po zderivování

$$\frac{dh}{dT} = \frac{h}{\sigma} \frac{d\sigma}{dT} \quad (2.19)$$

a

$$\frac{dh}{dc} = \frac{h}{\sigma} \frac{d\sigma}{dc}. \quad (2.20)$$

Funkci povrchového napětí zderivujeme podle teploty a koncentrace.

Co se týče čtvrtého a pátého členu vztahu (2.18), osmotický potenciál mísitelné látky v kapalině může být vyjádřen pomocí Van't Hoffovi rovnice (Low, 1955)

$$\psi_{\pi,Low} = RT \ln(\bar{a}),$$

kde  $R$  je univerzální plynová konstanta a  $\bar{a}$  je aktivita vody (viz. odstavec aktivita roztoku vody na straně 19).  $\psi_{\pi,Low}$  nemá kompatibilní dimenzi, proto chceme

<sup>3</sup>V článku Nassar & Horton (1989b), ze kterého Nonorio et al. (1996b) vychází je tlaková výška jen funkce objemové vlhkosti a teploty.

takto vyjádřený osmotický potenciál převést na dimenzi použitou v Noboriho modelu. Tento vztah proto musí být vydělen molekulární hmotností vody  $M_w$ . Poté dostaneme osmotický potenciál se správnou dimenzí, tedy

$$\psi_\pi = \frac{RT}{M_w} \ln(\bar{a}) \quad (2.21)$$

Rovnice (2.21) je derivována podle teploty a koncentrace a dosazena do rovnice (2.14). Derivace podle koncentrace je provedena přes aktivitu vody  $\bar{a}$ , která je závislá na koncentraci. Výsledné derivace vypadají následovně:

$$\frac{d\psi_\pi}{dT} = \frac{R \ln(\bar{a})}{M_w} \quad (2.22)$$

a

$$\frac{d\psi_\pi}{dc} = \frac{RT \ln(\bar{a})}{cM_w}. \quad (2.23)$$

**Aktivita roztoku vody** Aktivita vody vychází z Gibbsovi volné energie, z které je odvozen chemický potenciál solventu a v něm rozpuštěné látky (Robinson & Stokes, 2002). Chemický potenciál solventu  $A$ , resp. rozpuštěné látky  $B$ , je definován pro konstantní tlak, teplotu a látkové množství solventu, resp. rozpuštěné látky jako

$$\bar{G}_A = \left( \frac{\partial G}{\partial n_A} \right)_{n_B, T, P},$$

kde  $G$  je Gibbsova volná energie,  $n_A$  a  $n_B$  látkové množství solventu  $A$  a rozpuštěné látky  $B$ . Protože zde chceme odvodit chemický potenciál pro proměnnou hodnotu koncentrace, je třeba stanovit referenční hodnotu  $\bar{G}_A^0$ , od které se bude odchylovat. Pro solvent (v tomto případě je to voda) je hodnota  $\bar{G}_A^0$  odvozena pro čistou vodu bez přidané rozpuštěné látky. Pro konstantní teplotu a tlak lze zapsat

$$\bar{G}_A - \bar{G}_A^0 = RT \ln(\bar{a}), \quad (2.24)$$

kde  $\bar{a}$  je aktivita daného solventu. Pokud je solvent v rovnováze se svou plynnou fází při tlaku  $p_A^0$  a rozpuštěná látka s plynnou fází solventu při parciálním tlaku

$p_A$  (Robinson & Stokes, 2002), je možno zapsat

$$\bar{G}_A^0 = \bar{G}_A^0(v) + RT \ln(\bar{p}_A^0), \quad (2.25)$$

$$\bar{G}_A = \bar{G}_A^0(v) + RT \ln(\bar{p}_A), \quad (2.26)$$

kde  $v$  je počet molů iontu rozpustitelné látky vzniklých z molu této látky. Z rovnic (2.24), (2.25) a (2.26) vyjde vztah aktivity daného solventu

$$\bar{a} = \frac{p_A}{p_A^0}. \quad (2.27)$$

V tomto vzorci je použit celkový tlak  $p_A^0$  a parciální tlak  $p_A$  plyných fází. Jejich poměr je ale stejný pro odpovídající veličiny kapalné fáze, proto je lze pro odvození aktivity použít (Robinson & Stokes, 2002). Obdobně by se dala odvodit aktivita rozpuštěné látky. Zde definovaná není, neboť v modelu DRU $\ddot{t}$ ES jí netřeba. Hodnoty aktivity vody s určitým obsahem vybraných chemických látek jsou uvedené v Robinson & Stokes (2002) jako tabulkové hodnoty. V Nonorio et al. (1996a) byl model použit pro transport *NaCl*. V řídicích rovnicích je použita aktivita jako funkce koncentrace. Proto bylo třeba proložit tabulkové hodnoty, uvedené v (Robinson & Stokes, 2002), křivkou. Tabulkové hodnoty jsou ukázány v příloze A.4 v tabulce A.1. Proložením pomocí metody nejmenších čtverců<sup>4</sup> byl získán předpis kvadratické funkce

$$\bar{a}(c) = 1.0 - 0.031c - 0.0015c^2, \quad (2.28)$$

který byl implementován do modelu. Pro  $c = 0$  z rovnice (2.27) i (2.28) vidíme, že parciální tlak a celkový tlak je stejný (aktivita je 1, látka nemá žádné jiné složky než samu sebe),  $\bar{a}$  je tedy rovno jedné. Nulový přirozený logaritmus  $\ln(1)$  následně vyruší vliv koncentračního gradientu z úlohy.

Gradient vlhkostního a osmotického potenciálu nemusí mít na transport vlhkosti stejný vliv. Proto se člen odvozený z osmotického potenciálu násobí koeficientem  $\gamma$ , který nabývá hodnot  $\gamma \in \langle 0, 1 \rangle$ . Tento koeficient zahrnuje teorii popsanou v podkapitole 2.2. Pokud tedy porézní prostředí, jako domnělá membrána, zcela zabraňuje pohybu molekul rozpuštěné látky, je tento koeficient roven jedné a osmotický potenciál se plně podílí na celkovém potenciálu. Pokud porézní

<sup>4</sup>Jednoduše  $\beta = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \bar{\mathbf{a}}$

prostředí molekulám rozpuštěné látky nebrání, je koeficient  $\gamma$  roven 0 a případný osmotický potenciál nemá na celkový potenciál žádný vliv. Tento koeficient  $\gamma$  lze odvodit z (Kemper & Evans, 1963) jako

$$\gamma = \frac{r_s - r_w}{b - r_w} \quad \text{pro } r_s \leq b,$$

kde  $r_s$  je poloměr molekuly rozpuštěné látky,  $r_w$  poloměr molekuly vody a  $b$  půlka tloušťky filmu vody na částech půd, která vyjadřuje velikost průduchu v pomyslné membráně. Pokud platí  $r_s > b$ , je molekulám rozpuštěné látky zcela zabráněno v pohybu mezi póry a vliv osmotického a hydraulického gradientu je rovnocenný a působí proti sobě. U půd obsahujících množství jílu bude tato hodnota spíše blíže jedné, u písků či jiných hrubozrnných nestrukturních půd bude blíže nule.

Dle modelu Nonorio et al. (1996b) je člen  $\frac{h}{\sigma} \frac{d\sigma}{dT}$  násoben konstantní hodnotou *gain* faktoru  $G_\Psi$ , pro zahrnutí vlivu tepla na odvození hydraulického potenciálu. Ve smyslu původního odvození (Nassar & Horton, 1989b) je třeba do vzorce zahrnout absolutní hodnotu  $h$ .

Pokud dosadíme vztah (2.19) a (2.20) a rovnici (2.22) a (2.23) do gradientu celkového potenciálu (2.18) a zohledníme skutečnosti uvedené v předchozím odstavci, získáme

$$\nabla\Psi = \nabla h + G_\Psi \frac{|h|}{\sigma} \frac{d\sigma}{dT} \nabla T + \frac{|h|}{\sigma} \frac{d\sigma}{dc} \nabla c + \gamma \frac{R \ln(\bar{a})}{M_w} \nabla T + \gamma \frac{RT \ln(\bar{a})}{cM_w} \nabla c + 1.$$

Po dosazení tohoto vztahu zpět do Darcy-Buckinghamovy rovnice získáme celkovou rovnici toku vody v porézním prostředí za vlivu teplotního a koncentračního gradientu

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_l = & -K(h)\nabla h - K(h)G_\Psi \frac{|h|}{\sigma} \frac{d\sigma}{dT} \nabla T - K(h) \frac{|h|}{\sigma} \frac{d\sigma}{dc} \nabla c \\ & - K(h)\gamma \frac{R \ln(\bar{a})}{M_w} \nabla T - K(h)\gamma \frac{RT \ln(\bar{a})}{cM_w} \nabla c - K(h)i. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Rovnici (2.29) můžeme přeskupit vytknutím jednotlivých gradientů do tvaru

$$\mathbf{q}_l = -K(h)\nabla h - K(h) \left( G_\Psi \frac{|h|}{\sigma} \frac{d\sigma}{dT} + \gamma \frac{R \ln(\bar{a})}{M_w} \right) \nabla T - K(h) \left( \frac{|h|}{\sigma} \frac{d\sigma}{dc} + \gamma \frac{RT \ln(\bar{a})}{cM_w} \right) \nabla c - K(h)i. \quad (2.30)$$

Nyní můžeme z rovnic (2.14) a (2.30) odvodit příslušné vodivostní koeficienty pro kapalnou fázi ve smyslu rovnice (2.14) použité v modelu, tedy:

$$K_{\Psi l} = K(h), \quad (2.31)$$

$$K_{Tl} = K(h) \left( G_\Psi \frac{|h|}{\sigma} \frac{d\sigma}{dT} + \gamma \frac{R \ln(\bar{a})}{M_w} \right), \quad (2.32)$$

$$K_{cl} = K(h) \left( \frac{|h|}{\sigma} \frac{d\sigma}{dc} + \gamma \frac{RT \ln(\bar{a})}{cM_w} \right). \quad (2.33)$$

$K_{\Psi l}$  je vodivostní koeficient vyjadřující vliv potenciálu na tok kapalně fáze [ $M.t.L^{-3}$ ],  $K_{Tl}$  vyjadřuje vliv teploty na tok kapalně fáze [ $M.L^{-1}.T^{-1}.t^{-1}$ ] a  $K_{cl}$  vliv koncentrace na tok kapalně fáze [ $M^2.L^{-1}.M^{-1}.t^{-1}$ ].

#### 2.4.2.2 Tok plynné fáze.

Základní vztah, ze kterého se při popisu transportu plynu v půdním prostředí vychází, je Fickův zákon (Cass et al., 1984)

$$\mathbf{q}_v = -D_a \Omega a \nabla \rho_v, \quad (2.34)$$

kde  $D_a$  je molekulární difuzivita vodních páry ve vzduchu [ $L^2 t^{-1}$ ],  $\Omega$  je faktor zahrnující tortuozitu [-],  $a$  podíl pórů vyplněných vzduchem [-] a  $\rho_v$  hustota vodních par [ $ML^{-3}$ ].  $\Omega$  je funkce objemové vlhkosti  $\Omega(\theta) = (n - \theta)^{2/3}$ . V Noboriho modelu se uvažuje, že  $\Omega(\theta) = a^{2/3}$ . Součin  $\Omega a$  je tedy nahrazen pouhým  $a^{5/3}$ . Dále se vychází z obdobného vyjádření potenciálu jako při odvozování toku kapalně fáze jen se zanedbáním hloubky referenční hladiny, tedy zanedbáním vlivu gravitace

$$\Psi = h + \psi_\pi. \quad (2.35)$$



Pokud je kapalná a plynná fáze v půdě v rovnováze, rovnici (2.35) je možné přepsat pomocí stavové rovnice pro plyn jako

$$\frac{RT}{M_w} \ln h_r = \frac{RT}{M_w} \ln h_m + \frac{RT}{M_w} \ln h_\pi, \quad (2.36)$$

kde  $h_r$  je relativní vlhkost vycházející z celkového potenciálu,  $h_m$  je relativní vlhkost odvozená z hydraulického potenciálu a  $h_\pi$  relativní vlhkosti odvozená z osmotického potenciálu. Rovnici (2.36) lze zjednodušit na

$$h_r = h_m h_\pi.$$

Z prvního členu na pravé straně rovnic (2.35) a (2.36) získáme vztah pro  $h_m$

$$h_m = \exp\left(\frac{M_w h}{RT}\right).$$

Z nezderivovaného vzorce (2.21) a posledního členu rovnice (2.36) získáme pouze rovnost  $h_\pi = \bar{a}$ . Pokud je tedy plynná a kapalná fáze v porézním prostředí v rovnováze, můžeme napsat, že

$$\rho_v = \rho_s h_m h_\pi, \quad (2.37)$$

kde  $\rho_s$  je hustota plně nasycených půdních par [ $M.L^{-3}$ ] (závislá na teplotě, příloha A.5 vzorec A.12). Aktuální hustota půdních par je hustota nasycených vodních par vynásobená celkovou relativní vlhkostí  $h_r$ .

Relativní vlhkosti  $h_m$  je závislá na tlakové výšce, hustota nasycených vodních par  $\rho_s$  je závislá na teplotě a osmotická relativní vlhkost  $h_\pi$ , která se rovná aktivitě  $\bar{a} = h_\pi$ , na koncentraci. Derivací vztahu (2.37) získáme

$$\nabla \rho_v = \rho_s \bar{a} \frac{\partial h_m}{\partial \Psi} \nabla \Psi + h_m \bar{a} \frac{\partial \rho_s}{\partial T} \nabla T + \rho_s h_m \frac{\partial \bar{a}}{\partial c} \nabla c. \quad (2.38)$$

V rovnici (2.38) je nyní třeba vyjádřit derivace  $\frac{dh_m}{d\Psi}$ ,  $\frac{d\rho_s}{dT}$  a  $\frac{d\bar{a}}{dc}$ , tedy

$$\frac{dh_m}{d\Psi} = \exp\left(\frac{Mh}{RT}\right) \frac{M_w}{RT}.$$

Derivace  $\rho_s$  je ukázána v apendixu A.5. Derivace  $\frac{d\bar{a}}{dc}$  dle Nonorio et al. (1996b)

vypadá následovně

$$\frac{d\bar{a}}{dc} = \bar{a} \frac{\ln(\bar{a})}{c}.$$

Nyní tyto tři derivace dosadíme do rovnice (2.38). Takto upravenou rovnicí (2.38) pak substituujeme do vztahu (2.34). Výsledná rovnice tedy je

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_v = & -D_a a^{5/3} \rho_s \bar{a} \exp\left(\frac{Mh}{RT}\right) \frac{M_w}{RT} \nabla \Psi - D_a a^{5/3} \exp\left(\frac{Mh}{RT}\right) \bar{a} \frac{\partial \rho_s}{\partial T} \nabla T - \\ & - D_a a^{5/3} \rho_s \exp\left(\frac{Mh}{RT}\right) \bar{a} \frac{\ln(\bar{a})}{c} \nabla c. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Vliv teplotního gradientu musí být zvýšen. To potvrdilo zejména experimentální měření (Philip & de Vries, 1957). Původní představa byla, že vodní páry se půdním prostředím pohybují jen v oblasti vyplněné půdním vzduchem a voda zavěšená v půdním prostředí tomuto transportu brání. Philip & de Vries (1957) tuto teorii rozšířili a řekli, že půdní páry se mohou transportovat vlivem teplotního gradientu i skrze tuto zavěšenou vodu. Vodní páry na jedné straně menisku zavěšené vody kondenzují a na druhé se následně vypařují. Tímto způsobem vzniká, dle Philip & de Vries (1957), makroskopickým úhlem pohledu i tok půdních par skrze zavěšenou vodu. Proto se zavádí koeficient  $\eta$  větší než 1, který má tento efekt do rovnic zahrnout.  $\eta$  má předpis (Cass et al., 1984)

$$\eta = 9.5 + 6\theta - 8.5 \exp\left(-((1 + 2.6/\sqrt{f_c})\theta)^4\right).$$

Vodivostní koeficienty vyjadřující vliv gradientu potenciálu, teplotního a koncentračního gradientu na tok půdních par tedy jsou

$$K_{\Psi v} = -D_a a^{5/3} \rho_s \bar{a} \exp\left(\frac{Mh}{RT}\right) \frac{M_w}{RT}, \quad (2.40)$$

$$K_{Tv} = -D_a a^{5/3} \exp\left(\frac{Mh}{RT}\right) \bar{a} \frac{\partial \rho_s}{\partial T} \eta, \quad (2.41)$$

$$K_{Cv} = -D_a a^{5/3} \rho_s \exp\left(\frac{Mh}{RT}\right) \bar{a} \frac{\ln(\bar{a})}{c}. \quad (2.42)$$

Na obrázku 2.5, 2.6 a 2.7 jsou ukázány všechny vodivosti z tabulky 2.2. Hodnoty jednotlivých parametrů použitých pro vykreslení těchto vztahů jsou v ta-

bulce 2.3. V tabulce 2.3 jsou pro přehlednost i funkce parametrů, které jsou již v textu ukázány. Některé empirické vztahy použité v modelu dle Nonorio et al. (1996a) jsou odvozeny pro jiné jednotky, než používá model DRUtES. Převodní vztahy jsou ukázány na začátku tabulky 2.3.

**Tabulka 2.3:** Hodnoty parametrů konstitučních vztahů

| Převodní vztahy   |   | Jednotky               |                 |
|-------------------|---|------------------------|-----------------|
| $T_{\circ C} =$   | $273.15 - T$  | $[^{\circ}C]$          |                 |
| $c_{mol} =$       | $\frac{c}{(M_s(1.0-c))}$ ,  | $[mol.kg^{-1}]$        |                 |
|                   | $M_s = 0.05844$   | $[kg.mol^{-1}]$        |                 |
| Hodnoty parametrů |   |                        |                 |
| Označení          | Hodnota   | Jednotky               |                 |
| $G_{\Psi} =$      | 5   | $[-]$                  |                 |
| $M_w =$           | 0.018015  | $[kg.mol^{-1}]$        |                 |
| $a =$             | $\theta_s - \theta$   | $[m^3.m^{-3}]$         |                 |
| $R =$             | 8.314   | $[J.mol^{-1}.K^{-1}]$  |                 |
| Označení          | Funkční předpis   | Parametry funkce       | Jednotky        |
| $D_a =$           | $2.12 \cdot 10^{-5} (T/273.15)^2$   |                        | $[m^2.s]$       |
| $\sigma =$        | $7.5617 \cdot 10^{-2} - 1.3595 \cdot 10^{-4} T_{\circ C} -$<br>$-4.0815 \cdot 10^{-7} T_{\circ C}^2 + 1.6342 \cdot 10^{-3} c_{mol}$ |                        | $[N.m^{-1}]$    |
| $\bar{a} =$       | $1.0 - 0.031c - 0.0015c^2$  |                        | $[-]$           |
| $\rho_s =$        | $\frac{\exp(31.3716 - 6014.79/T - 7.92495 \cdot 10^{-3} T)}{T} 10^{-3}$   |                        | $[kg.m^{-3}]$   |
| $\gamma =$        | $\frac{r_s - r_w}{b - r_w}$ pro $r_s \leq b$ ,  |                        | $[-]$           |
|                   |   | $r_s = 0.35,$          | $[nm]$          |
|                   |   | $r_w = 0.15,$          | $[nm]$          |
|                   |   | $b = \theta/sp^*$      | $[nm]$          |
|                   |   | $sp = 1.01 \cdot 10^5$ | $[m^2.kg^{-1}]$ |
| $\eta =$          | $9.5 + 6\theta - 8.5 \exp(-((1 + 2.6/\sqrt{f_c})\theta)^4),$  | $f_c = 0.2$            | $[m^3.m^{-3}]$  |

\*specifický povrch

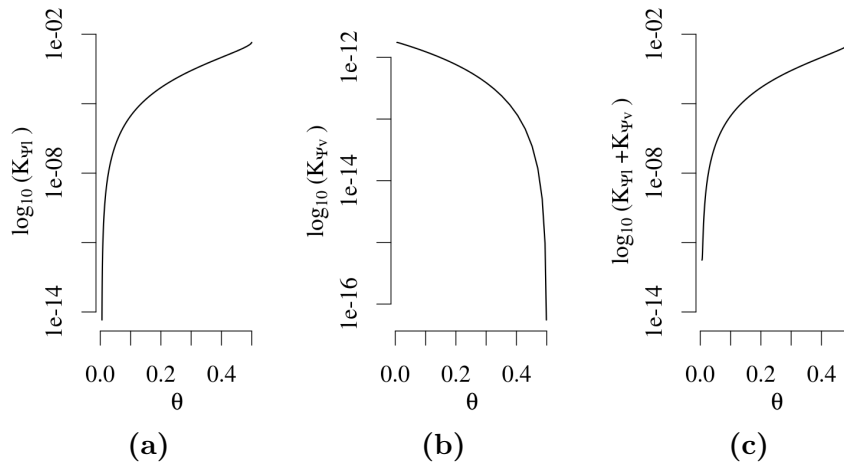
Hodnoty daných funkčních vztahů jsem převzal z Nonorio et al. (1996b) a Nassar & Horton (1989b). Koncentrace i teplota jsou v tomto případě konstantní,  $c = 0.0001 \text{ kg/kg}$  a  $T = 300 \text{ K}$ .

Vodivost vyjadřující vliv gradientu potenciálu je Mualemův model nenasycené hydraulické vodivosti, rovnice (2.5) a rovnice (2.6). Mualemův model je ukázán na obrázku 2.5a. Na obrázku 2.5b je znázorněna vodivost vyjadřující vliv gradientu tlakové výšky na tok vodních par. Pro zcela nasycené prostředí je tato  $K_{\Psi_v}$  téměř nulová, což vychází z předpokladu, že v takovém prostředí dominuje tok kapalně vody. Čím je prostředí méně nasycené, tím je vliv par na celkový tok větší. Celkový vodivostní vliv na gradient hydraulické výšky je dán součtem  $K_{\Psi_v}$  a  $K_{\Psi_l}$ . Přestože  $K_{\Psi_v}$  je řádově menší než  $K_{\Psi_l}$ , je na obrázku 2.5c vidět, že zejména při menším nasycení je celková vodivost  $K_{\Psi_v}$  ovlivněna. V případě nulového či

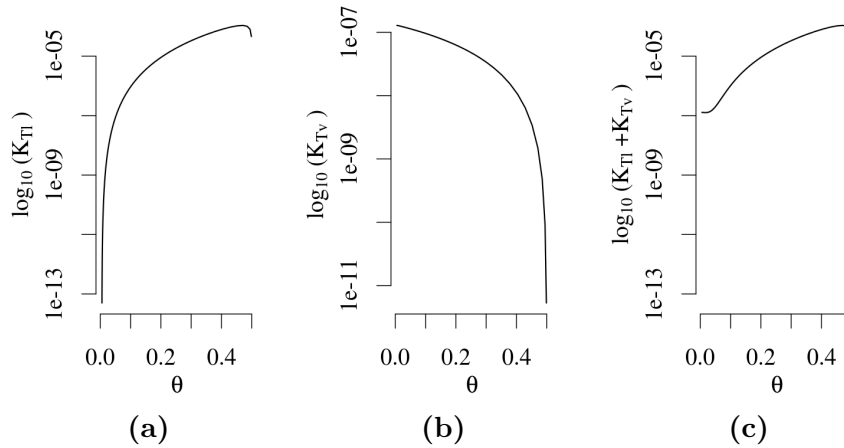
reziduálního nasycení začne křivka  $K_{\Psi v}$  prudce klesat k nule (na obrázku 2.5b není tento fakt ukázán).

Vliv teplotního gradientu je zanedbatelný ve velmi suchých či velmi nasycených půdách (de Vries, 1958). Za přítomnosti rozpuštěné látky je vodivost  $K_{Tl}$  při vysokém nasycení pro zadané hodnoty lehce záporná (tento fakt nelze na grafu s logaritmickou osou ukázat). Fyzikální význam vychází z odvození vlivu osmotického potenciálu. Jak jsem popsal v podkapitole 2.2, vliv osmotického potenciálu je opačný proti potenciálu hydraulickému, ale i teplotnímu. Vliv osmotického potenciálu, tak jak je odvozen v Nassar & Horton (1989b), má největší vliv v silně nasycených půdách. To je zohledněno ve vzorci 2.32 pomocí koeficientu  $\gamma$ . Vodivost vyjadřující vliv teploty na tok vodních par  $K_{Tv}$  a její tvar má podobný význam jako vodivost popisující tok par pod gradientem tlakové výšky. Tato křivka je zobrazena na obrázku 2.6b. Vodivost vyjadřující vliv teplotního gradientu na tok celkové vlhkosti je ukázána na obrázku 2.6c.

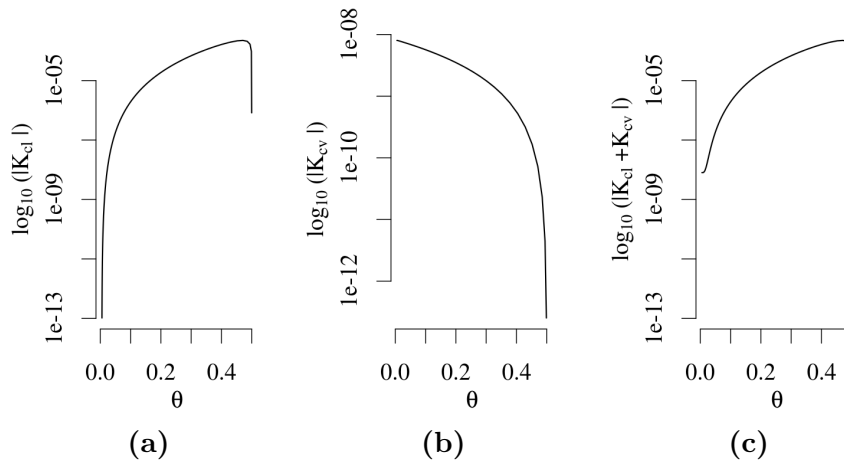
Na obrázcích 2.7 jsou, ve stejném smyslu jako v předchozích případech, vykresleny průběhy vodivostí ovlivňující tok skrze gradient koncentrace mísitelné látky. Konkrétně obrázek 2.7a vliv koncentračního gradientu na tok kapaliny, obrázek 2.7b vliv koncentračního gradientu na tok vodních par a obrázek 2.7c vliv koncentračního gradientu na tok celkové vlhkosti.  $K_{cl}$  je v tomto případě záporné pro všechny vodivosti. Fyzikálním významem opačného znaménka je vliv osmotického potenciálu, který z hlediska vody působí v opačném směru proti hydraulickému potenciálu.



**Obrázek 2.5:** Jednotlivé vodivosti: (a) pro tok kapaliny, (b) pro tok vodních par, (c) součet toků



**Obrázek 2.6:** Jednotlivé vodivosti: (a) pro tok kapaliny, (b) pro tok vodních par, (c) součet toků



**Obrázek 2.7:** Jednotlivé vodivosti: (a) pro tok kapaliny, (b) pro tok vodních par, (c) součet toků

## 2.5 Řídící rovnice

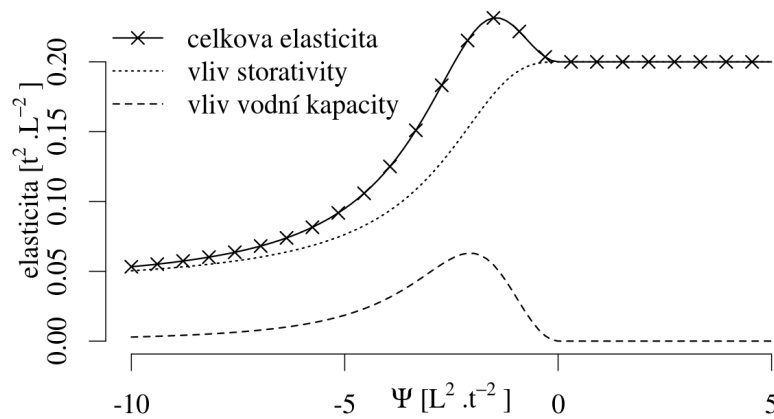
Transportní procesy lze v obecnosti popsat tzv. advektivně reakčně disperzní rovnicí (např. (Císlerová & Vogel, 1998)). V rámci této práce jsem řešil sdružené transporty hmoty resp. vlhkosti, tepla a koncentrace mísitelné látky. Všechny tyto tři procesy lze obecně vyjádřit nějakou formou advektivně reakčně disperzní rovnice. Richardsova rovnice, popisující transport vlhkosti, sice není advektivní disperzní rovnice, přesto ji však, po malé úpravě, z hlediska použité numeriky lze takto uvažovat. Numerickému řešení rovnic popsanych v této podkapitole se věnuji v kapitole následující. V tomto případě nebyla ani v jednom procesu zahrnuta reakce, proto se budu o těchto rovnicích zmiňovat jako o advektivně disperzních.

### 2.5.1 Transport vlhkosti

Transport vody je v modelu popsán Richardsovou rovnicí (Richards, 1931). V modelu dle Nonorio et al. (1996a) je vyjádřena ve tvaru

$$\left( S_s \frac{\theta}{n} + C(\Psi) \right) \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{q}_l}{\rho_l} + \frac{\mathbf{q}_v}{\rho_w} \right) + \frac{\partial K_{\Psi l}}{\partial z}, \quad (2.43)$$

kde  $S_s$  je specifická storativita [ $t^2 \cdot L^{-2}$ ],  $C(\Psi)$  je vodní kapacita a platí, že  $C(\Psi) = \frac{d\theta}{d\Psi} [L^2 \cdot t^{-2}]$ ,  $t$  čas,  $\rho_l$  hustota roztoku vody a dané rozpuštěné látky (rovnice (2.12)),  $\rho_w$  hustota čisté vody jako funkce teploty, rovnice (2.13),  $\mathbf{q}_l$  a  $\mathbf{q}_v$  jsou toky popsané rovnicemi (2.14) a (2.15) v kapitole 2.4.2. Jedná se tzv. modifikovanou Richardsovu rovnici. Modifikace spočívá v tom, že je schopna počítat i s prouděním v nasyceném prostředí. V nenasyceném prostředí udává elasticitu prostředí vodní kapacita  $C(\Psi)$  a v nasyceném specifická storativita  $S_s$ . Poměr  $\theta/n$  dává specifické storativitě stále větší váhu při zavodňování prostředí až po jeho úplném nasycení (kde je  $C(\Psi) = 0$ ), kde přebírá úlohu elasticity jen specifická storativita. Vliv jednotlivých elasticit je ilustrován na obrázku 2.8.



Obrázek 2.8: Vliv storativity v nasycené a nenasycené zóně

#### 2.5.1.1 Počáteční a okrajové podmínky transportu vlhkosti

K vyřešení časově závislých parciálních diferenciálních rovnic je třeba definovat počáteční a okrajové podmínky na celé řešené oblasti  $\Omega$ . Počáteční podmínka pro

rovnici transportu vlhkosti definuje potenciál v čase  $t_0 = 0$  na oblasti  $\Omega$  jako

$$\Psi(t_0, \mathbf{x}) = \Psi_0 \quad \text{pro } \forall \mathbf{x} \in \Omega.$$

Dirichletova okrajová podmínka udávající stav potenciálu na hranici  $\Gamma_D$  oblasti  $\Omega$

$$\Psi(t, \mathbf{x}) = \Psi = \Psi_D \quad \text{pro } \forall \mathbf{x} \in \Gamma_D, \quad t > t_0.$$

Neumannova okrajová podmínka udávající normálový tok vlhkosti na hranici  $\Gamma_N$  oblasti  $\Omega$

$$\mathbf{q}_w(t, \mathbf{x}) = -(K_{\Psi l} + K_{\Psi v}) \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{n}} - (K_{Tl} + K_{Tv}) \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} - (K_{cl} + K_{cv}) \frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}} - K_{\Psi l} n_3 = \mathbf{q}_{wN}$$

pro  $\forall \mathbf{x} \in \Gamma_N, \quad t > t_0.$

V modelu DRUtES jsou definovány další speciální okrajové podmínky (Kuráž, 2011). Jedna z těchto okrajových podmínek je volná drenáž. Na této hranici je gradient potenciálu roven nule. Tok přes tuto hranici je roven pouze volnému gravitačnímu odtoku. Matematicky je definovaná jako

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{n}}(t, \mathbf{x}) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_D, \quad t > t_0.$$

Tok na této hranici je tedy pouze  $K_{\Psi l} n_3$ .

## 2.5.2 Transport tepla

Rovnici transportu tepla, kde je zahrnut vliv toku plynné a kapalné látky, odvodil de Vries (1958). V tomto modelu je do této rovnice navíc přidán člen vlivu koncentrace Nonorio et al. (1996a). Rovnice vypadá

$$C_s \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_* \Delta(T) - L_w (\nabla \cdot (K_{\Psi v} \nabla \Psi + K_{Cv} \nabla c)) - C_l \nabla \cdot (\mathbf{q}_l T), \quad (2.44)$$

kde  $C_s$  je objemová tepelná kapacita pevné fáze [ $M.t^{-2}.L^{-1}.T^{-1}$ ],  $\lambda_*$  je tepelná vodivost porézního prostředí, pokud v daném prostředí nedochází k transportu vlhkosti [ $M.L.t^{-3}.T^{-1}$ ] (zdánlivá tepelná vodivost),  $L_w$  je latentní teplo spotřebované

při vypařování [ $L^2.t^{-2}$ ] (povšimněme si záporného znaménka před difuzním členem, které vyjadřuje odevzdávání tepla do okolní kapaliny),  $Cl$  je specifické teplo půdní vody [ $L^2.t^{-2}.K^{-1}$ ]. Poslední člen vyjadřuje teplo, které je odevzdáno kapalně fázi porézním prostředím.

### 2.5.2.1 Počáteční a okrajové podmínky transportu tepla

U transportu tepla je počáteční podmínka na oblasti  $\Omega$  definovaná jako

$$T(t_0, \mathbf{x}) = T_0 \quad \text{pro} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega.$$

Okrajové podmínky definované na okraji  $\Gamma$  jsou dvojího typu. Dirichletova okrajová podmínka

$$T(t, \mathbf{x}) = T = T_D \quad \text{pro} \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_D, \quad t > t_0$$

a Neumannova okrajová podmínka

$$\mathbf{q}_T(t, \mathbf{x}) = \lambda_* \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{q}_{TN} \quad \text{pro} \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_N, \quad t > t_0.$$

### 2.5.3 Transport mísitelné látky

Řídící rovnice pro transport rozpuštěné látky je klasická advekčně-disperzní rovnice (Kodešová, 2005)

$$\theta \rho_l \frac{\partial c}{\partial t} = \theta \rho_l D \Delta c - \nabla \cdot (\mathbf{q}_l c), \quad (2.45)$$

kde  $D$  je hydrodynamická disperze [ $L^2.t^{-1}$ ] a  $\mathbf{q}_l$  je tok dle rovnice (2.14). Tato rovnice předpokládá transport mísitelné látky jen kapalnou fází.

#### 2.5.3.1 Hydrodynamická disperze

Hydrodynamická disperze vyjadřuje šíření rozpuštěné látky v půdním prostředí a zahrnuje v sobě dva děje. Pokud bychom hleděli na proudění v mikroskopickém měřítku, bylo by patrné, že kapalina, která nese rozpuštěnou látku, se pohybuje



různě zakřivenými či propojenými a různě dlouhými póry. To způsobuje, že se rozpuštěná látka rozprostře longitudinálně ve směru proudění. Rychlostní profil proudící kapaliny je ovlivněn stěnami pórů, proto je rychlost kapaliny nejvyšší uprostřed póru a na jeho stěnách je minimální (teoreticky nulová). Tato část hydrodynamické disperze se nazývá mechanická disperze, neboť ji způsobuje mechanický pohyb nosiče rozpuštěné látky. Další děj, který způsobuje disperzi, je molekulární disperze, která vzniká na molekulární úrovni neustálým neuspořádaným pohybem molekul rozpuštěné látky v kapalině. Proto je celková hydrodynamická disperze  $D$  určena jako suma mechanické a molekulární disperze (Bear, 2012)

$$D = D_{mech} + D_{mol}$$

Je zřejmé, že pokud nebude kapalina v pohybu, nedojde k dějům způsobujícím mechanickou disperzi. Naopak, pokud bude mít proudění velkou rychlost, vliv molekulární disperze bude zanedbatelný. Proto se zavádí tzv. Péceletovo číslo, které zahrnuje velikosti pórů, rychlost proudění a porovnává je s molekulární disperzí. Péceletovo číslo  $Pe$  odpovídá

$$Pe = \frac{vd}{D_{mol}},$$

z tohoto čísla pak vycházejí různá kritéria, kdy lze do hydrodynamické disperze zahrnout vliv mechanické, molekulární či obou disperzí. Císlerová & Vogel (1998) například uvádí

$$D = \begin{cases} D_{mol} & \text{pro } Pe \leq 0.3 \\ D_{mech} + D_{mol} & \text{pro } 0.3 < Pe < 20 \\ D_{mech} & \text{pro } 20 \geq Pe. \end{cases}$$

V Bear (2012) je ukázáno mnoho forem, jak lze hydrodynamickou disperzi vyjádřit. V Noborihio modelu (Nonorio et al., 1996a) je implementována pomocí vzorce

$$D = 2.8D_0\theta^3 + \kappa \frac{|\mathbf{q}|}{\rho_l\theta}, \quad (2.46)$$

kde  $D_0$  je difuzní koeficient pro danou rozpuštěnou látku [ $L^2.t^{-1}$ ] (funkce

teploty příloha A.5 vzorec (A.11)) a  $\kappa$  je disperzivita  $[L]$ . Mechanická disperze je ovlivněna anizotropií prostředí, proto je  $\kappa$  tenzor.

### 2.5.3.2 Počáteční a okrajové podmínky transportu mísitelné látky

Pro transport koncentrace rozpuštěné látky je počáteční podmínka na oblasti  $\Omega$  definovaná jako

$$C(t_0, \mathbf{x}) = c_0 \quad \text{pro} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega.$$

Okrajové podmínky definované na okraji  $\Gamma$  jsou dvojího typu. Dirichletova okrajová podmínka

$$c(t, \mathbf{x}) = c = c_D \quad \text{pro} \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_D, \quad t > t_0$$

a Neumannova okrajová podmínka

$$\mathbf{q}_c(t, \mathbf{x}) = D \frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{q}_{cN} \quad \text{pro všechna} \quad \mathbf{x} \in \Gamma_N, \quad t > t_0.$$

### 2.5.4 Sdružení transportních procesů

Sdružené transportní procesy vyjadřují rovnice, které jsou spojené určitým členem rovnice. V tomto případě je tento člen obecně součástí advektivně reakčně disperzní rovnice. Pro nějaký proces  $p$  definovaný v čase a prostoru, který je samostatný (nesdružený), může vypadat obecná advektivně reakčně disperzní rovnice následovně:

$$E \frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla p) - \nabla \cdot (\mathbf{q} p) + r(t, p).$$

$E$  je elasticita prostředí,  $D$  disperzní koeficient,  $\mathbf{q}$  je tok v prostředí nesoucí proces  $p$  advektivně a  $r(t, p)$  je nějaká reakce závislá na čase a procesu<sup>5</sup>. Mějme  $N$  procesů, které jsou sdružené pomocí elasticity, advektivního, disperzního i reakčního členu. Tento transport popisuje soustava  $N$  rovnic vypadajících pro  $i = 1, \dots, N$  a  $j =$

<sup>5</sup>Označení koeficientů této obecné rovnice je pouze ilustrační pro účely této podkapitoly a nesouvisí se značením ve zbytku textu.

$1, \dots, N$  následovně

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N E_{1j} \frac{\partial p_j}{\partial t} &= \sum_{j=1}^N \nabla \cdot (D_{1j} \nabla p_j) - \sum_{j=1}^N \nabla \cdot (\mathbf{q}_{1j} p_j) + \sum_{j=1}^N r(t_{1j}, p_j) \\ &\quad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \\ \sum_{j=1}^N E_{ij} \frac{\partial p_j}{\partial t} &= \sum_{j=1}^N \nabla \cdot (D_{ij} \nabla p_j) - \sum_{j=1}^N \nabla \cdot (\mathbf{q}_{ij} p_j) + \sum_{j=1}^N r(t_{ij}, p_j) \\ &\quad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \\ \sum_{j=1}^N E_{Nj} \frac{\partial p_j}{\partial t} &= \sum_{j=1}^N \nabla \cdot (D_{Nj} \nabla p_j) - \sum_{j=1}^N \nabla \cdot (\mathbf{q}_{Nj} p_j) + \sum_{j=1}^N r(t_{Nj}, p_j), \end{aligned}$$

kde například člen  $\nabla \cdot (D_{ij} \nabla p_j)$  můžeme číst jako disperzní vliv procesu  $j$  na transport procesu  $i$ . V konkrétním případě nemají na určitý proces vliv všechny ostatní skrze všechny transportní děje. K reprezentaci stávajícího modelu, tedy rovnice (2.43), (2.44) a (2.45), mějme jako *Disp* označený disperzní tok, jako *Adv* označen advekční tok a jako *Elas* označenu elasticitu. Reakční člen se ani v jedné z rovnic nevyskytuje. Tabulka 2.4, ukazuje, jaký vliv má  $j$ -tý proces na  $i$ -tý transport. Index  $i$  tedy označuje rovnici daného procesu a index  $j$  vliv procesů v  $i$ -té rovnici. Označení *Disp*, *Adv* a *Elas* pak v tabulce značí jakého typu je daný transport.

Jak je vidět v tabulce 2.4, transport kontaminantu nemá žádný sdružený člen. Kromě čistě sdružených členů se procesy navzájem ovlivňují v advekčních členech, kde jsou toky dle rovnic (2.14) či (2.15) rovněž ovlivněny ostatními procesy. Advekční člen je jedním ze zdrojů nelinearity tohoto problému. Ostatní procesy jsou sdružené pouze pomocí disperzního členu. V tabulce 2.4 tento fakt reprezentuje označení *Disp*, které se vyskytuje mimo „diagonálu“ tabulky. Stejně jako u transportu mísitelné látky, mají transport vlhkosti a tepla nelineární advekční člen.

**Tabulka 2.4:** Schematizace sdružení transportních rovnic v této práci

| i \ j |                  | 1                      | 2                      | 3                      |
|-------|------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
|       |                  | Vlhkosti               | Tepla                  | Mís. látky             |
| i     | Vlivem Transport |                        |                        |                        |
|       | Vlhkosti         | <i>Elas, Adv, Disp</i> | <i>Disp</i>            | <i>Disp</i>            |
|       | Tepla            | <i>Disp</i>            | <i>Elas, Disp, Adv</i> | <i>Disp</i>            |
|       | Mís. látky       | —                      | —                      | <i>Elas, Adv, Disp</i> |

Takto sdružené rovnice v podstatě tvoří soustavu tří parciálních diferenciálních rovnic o třech neznámých. Kromě advekčního členu způsobují nelinearitu rovněž vodivostní koeficienty závislé na tlakové výšce a násobící její derivaci. K řešení jsem tedy užil numerické řešení daných rovnic. Ze soustavy tří parciálních diferenciálních rovnic byla vytvořena pomocí Galerkinovi metody konečných prvků soustava obyčejných diferenciálních rovnic a časovou diskretizací pomocí implicitní Eulerovi metody soustava  $n$  lineárních rovnic o  $n$  neznámých. Toto numerické řešení jsem popsal v následující kapitole.

# Kapitola 3

## Numerické řešení

Jak jsem se zmínil na konci předchozí kapitoly, řešení problému definovaného sdruženými nelineárními rovnicemi je třeba získat numericky. Univerzální analytické řešení je v takovém případě nemožné. Model DRU<sub>t</sub>ES měl již implementovanou Galerkinovu metodu konečných prvků, proto jsem se ji v této kapitole pokusil, spíše intuitivně, vysvětlit. Na konci této kapitoly jsem ukázal, jak vypadají zdiskretizované řídicí rovnice v podobě, v jaké jsou načítány do výsledné soustavy, která je následně řešena.

### 3.1 Metoda konečných prvků

Metoda konečných prvků je jednou z numerických metod používaných pro řešení parciálních diferenciálních rovnic. Obecná parciální diferenciální rovnice může být zapsána jako

$$Au = f, \tag{3.1}$$

kde  $A$  je diferenciální operátor,  $u$  je hledaná neznámá funkce a  $f$  je libovolná funkce. V případě, že je rovnice (3.1) nelineární a není tedy možné najít analytické řešení, je třeba najít řešení numerické. V podkapitole 2.5 jsem se zmínil, že zdrojem nelinearity v tomto problému je především advekční člen a nenasycená hydraulická vodivost v součinu s řešeným potenciálem.

Skalární součet vektorů se rovná integrálu součinu funkcí na dané oblasti  $\Omega$

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle = \int_{\Omega} u w d\Omega. \quad (3.2)$$

U problému daného rovnicí (3.1) můžeme tedy v tomto duchu napsat

$$\langle \mathbf{A}\mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle = \int_{\Omega} A u w d\Omega,$$

kde  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{u}$  je matice a vektor. Pokud použijeme stejný princip i na pravé straně rovnice (3.1), získáme předpis

$$\langle \mathbf{A}\mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle = \langle \mathbf{f}, \mathbf{w} \rangle,$$

kde  $\mathbf{w}$  je libovolný vektor vyhovující danému předpisu. Lze tedy říci, že nějakou diferenciální rovnici lze na známé oblasti  $\Omega$  aproximovat vektory konečné velikosti. Z takto zadané rovnice a okrajových podmínek  $\Gamma$  lze obdržet řešení  $\mathbf{u}$  na oblasti  $\Omega$ .

Praktické použití této metody ukážu na jednoduchém příkladě, který bude následně aplikován na řešené řídicí rovnice. Mějme tedy diferenciální rovnici

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial u}{\partial x} \right) + f - p \frac{\partial u}{\partial t} = 0, \quad (3.3)$$

kde  $k$ ,  $f$  a  $p$  jsou libovolné známé funkce a  $u$  je funkce neznámá. Dále pak je třeba znát okrajové podmínky. Dirichletovu okrajovou podmínku vyjadřující stav na okraji oblasti

$$u = u_{\Gamma_d} \text{ na okraji } \Gamma_d, \quad (3.4)$$

či Neumannovu okrajovou podmínku vyjadřující normálový tok na okraji oblasti

$$\mathbf{q} = -k \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{q}_{\Gamma_n} \text{ na okraji } \Gamma_n. \quad (3.5)$$

Rovnice zapsaná ve tvaru (3.3) s okrajovými podmínkami (3.4) a (3.5) se nazývá silná forma (*strong form*). Pro aplikaci metody konečných prvků je třeba získat tzv. slabou formu této rovnice (*weak form*). Pokud budeme ctít pravid-

lo (3.2) můžeme zapsat, že (Strang & George, 1973)

$$\langle \mathbf{A}\mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle = \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x} w d\Omega.$$

Operátor  $A$  v rovnici odpovídá derivaci  $\frac{d}{dx}$  a  $w$  je libovolná testovací funkce. Integrál v této rovnici řešíme metodou *per-partes*. Řešení bude vypadat

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial x} w d\Omega = \int_{\Omega} u \frac{\partial w}{\partial x} d\Omega + \int_{\Gamma} u w \mathbf{n} d\Gamma.$$

Tento postup nyní aplikujme na rovnici (3.3). Integrujeme celou rovnici (3.3) a na první člen použijeme metodu *per-partes*. Levá strana rovnice (3.3) bude vypadat

$$\int_{\Omega} \left( k \frac{\partial u}{\partial x} \right) \frac{\partial w}{\partial x} d\Omega + \int_{\Omega} f w d\Omega - \int_{\Omega} p \frac{\partial u}{\partial t} w d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{q}_{\Gamma_n} w d\Gamma = 0. \quad (3.6)$$

Poslední člen na pravé straně této rovnice je Neumannova okrajová podmínka vzniklá při integraci. V silné formě rovnice (3.3) je derivace druhého řádu neznámé  $u$ . Po vynásobení funkcí  $w$  a integraci je tato druhá derivace podle  $u$  odstraněna. Požadavek rovnice na druhou derivaci je tedy touto metodou oslaben, proto se rovnice (3.6) nazývá slabá forma (Zienkiewicz et al., 2000).

Nyní je třeba aproximovat řešení rovnice  $u$  lineární kombinací zatím neznámých koeficientů  $U$  a tzv. bázových funkcí, jež známé jsou, tedy

$$u \approx U = U_a \phi_a(x) + \dots + U_n \phi_n(x) = \sum_{a=1}^n U_a \phi_a(x) \text{ pro } a \in \langle 1, \dots, n \rangle. \quad (3.7)$$

Stejným způsobem lze aproximovat testovací funkci  $w$ , tedy

$$w \approx W = W_a V_a(x) + \dots + W_n V_n(x) = \sum_{a=1}^n W_a V_a(x) \text{ pro } a \in \langle 1, \dots, n \rangle,$$

kde  $\phi$  a  $V$  jsou známé funkce. Touto aproximací se rovnice (3.6) konvertuje na soustavu obyčejných diferenciálních rovnic (Zienkiewicz et al., 2000). Bázová a testovací funkce,  $\phi$  a  $V$ , jsou na oblasti  $\Omega$  známé. Při numerickém řešení bude tato oblast rozdělena na konečný počet dílčích elementů  $e$ . Bázové a testovací jsou tedy známé i na každém tomto elementu. Nyní lineární kombinaci (3.7) dosadíme

za řešení  $u$  v rovnici (3.3) a obdržíme

$$R = -\frac{\partial}{\partial x} \left( k \sum_a U_a \frac{\partial \phi_a}{\partial x} \right) + f.$$

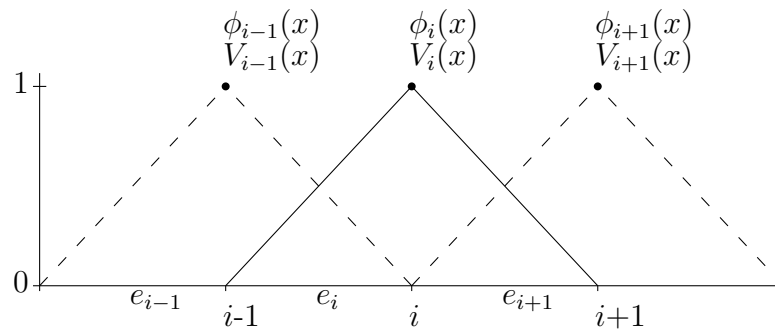
Toto  $R$  je nazývá reziduum. Pokud je toto reziduum  $R$  rovno časové derivaci, odpovídá aproximace (3.7) přesnému řešení rovnice. Hledáme tedy taková  $U_a$ , která nejlépe odpovídají předpisu

$$\int_{\Omega} R V_b \mathbf{d}\Omega = \int_{\Omega} p \sum_a \left( \frac{\partial U_a \phi_a}{\partial t} \right) V_b \mathbf{d}\Omega \text{ pro } b \in \langle 1, \dots, n \rangle.$$

Bázová funkce  $\phi$  je v čase konstantní. Integrál na pravé straně této rovnice integrujeme metodou *per-partes* kvůli odstranění vyšších derivací. Získaná soustava rovnic bude vypadat následně:

$$\int_{\Omega} k \sum_a U_a \left( \frac{\partial \phi_a}{\partial x} \right) \frac{\partial V_b}{\partial x} \mathbf{d}\Omega + \int_{\Omega} f V_b \mathbf{d}\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{q}_{\Gamma_n} V_b \mathbf{d}\Gamma - \int_{\Omega} p \sum_a \left( \frac{\partial U_a \phi_a}{\partial t} \right) V_b \mathbf{d}\Omega = 0. \quad (3.8)$$

**Galerkinova metoda** Galerkinova metoda spočívá v tom, že jsou vybrány báze a testovací funkce takové, že  $\phi_a = V_b$  pro  $a = b$ . Jako tyto funkce je možné vybrat například lineární funkce ukázané, pro 1D situaci, na obrázku 3.1. Obě funkce přiřazené uzlu  $i$  nabývají v tomto místě funkční hodnoty 1. K sousedním bodům se tato hodnota lineárně blíží 0.



**Obrázek 3.1:** Diskretizace 1D oblasti za použití lineárních testovacích a bázeových funkcí

Soustava obyčejných diferenciálních rovnic s neznámou  $\mathbf{U}$  bude tedy v obec-



nosti vypadat takto (de Costa et al., 1986):

$$\sum_{a=1}^{n-r} \left( K_{ab} U_a + L_{ab} \frac{\partial U_a \phi_a}{\partial t} \right) = -f_b \text{ pro počet rovnic } b = 1, 2, \dots, n-r, \quad (3.9)$$

kde  $r$  je počet uzlů s Dirichletovo okrajovou podmínkou (Neumannova okrajová podmínka je v tomto zápise vložena do vektoru  $\mathbf{F}$ ). Máme tedy matici  $\mathbf{K}_{(n-r) \times (n-r)}$ , matici  $\mathbf{L}_{(n-r) \times (n-r)}$  a vektor  $\mathbf{F}_{(n-r)}$ , které budou plněny ve smyslu rovnice (3.8).

Časová derivace je v modelu DRUtes řešena pomocí Eulerova implicitního zpětného schématu. Diferenciál  $\frac{\partial U_a \phi_a}{\partial t}$  byl nahrazen diferencí  $\frac{U_a \phi_a - U_{ap} \phi_{ap}}{\Delta t}$ , kde  $U_{ap} \phi_{ap} = u_p$  je předešlá známá hodnota použitá k výpočtu  $U_a$  ve stávajícím časovém kroku.  $\Delta t$  je délka časového kroku.

K získání matice  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{L}$  a vektoru  $\mathbf{F}$  jsou řešeny integrály pro element  $e_i$  takto

$$\mathbf{K}_{ab} = U_a \int_{e_i} k \frac{\partial \phi_a}{\partial x} \frac{\partial V_b}{\partial x} d\Omega$$

a

$$\mathbf{L}_{ab} = \int_{e_i} p \frac{U_a \phi_a - u_p}{\Delta t} V_b d\Omega = U_a \int_{e_i} p \frac{\phi_a}{\Delta t} V_b d\Omega - \int_{e_i} p \frac{u_p}{\Delta t} V_b d\Omega = \mathbf{L}_{lab} - \mathbf{L}_{pb}$$

a vektor  $\mathbf{F}$

$$\mathbf{F}_b = \int_{e_i} f V_b d\Omega + \int_{\Gamma_{e_i}} \mathbf{q}_{\Gamma_n} V_b d\Gamma.$$

$\mathbf{L}_{pb}$  již není matice, ale vektor. Přičteme jej k vektoru  $\mathbf{F}_b$ . Soustava obyčejných diferenciálních rovnic (3.9) byla tedy aplikací časové difference převedena na soustavu lineárních rovnic

$$\sum_{a=1}^{n-r} U_a (K_{ab} + L_{lab}) = -f_b - L_{pb} \text{ pro počet rovnic } b = 1, 2, \dots, n-r. \quad (3.10)$$

Matice  $\mathbf{J} = \mathbf{K} + \mathbf{L}$  je většinou plněna po elementech. Element je v 1D část řešené oblasti mezi diskretizačními body. Na obrázku 3.1 jsou znázorněny písmenem  $e$ . Nad elementem  $e_i$  jsou na obrázku 3.1 nenulové testovací a bázevé

funkce s indexem  $i - 1$  a  $i$ . Je tedy třeba vypočítat integrály

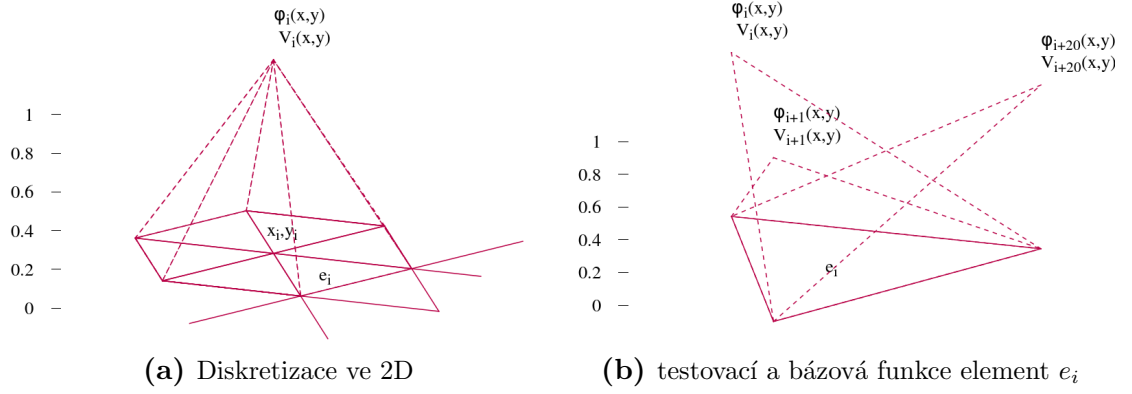
$$\begin{aligned}
 J_{a-1b-1} &= \int_{e_i} k \frac{d\phi_{a-1}}{dx} \frac{dV_{b-1}}{dx} dx + \int_{e_i} p \frac{\phi_{a-1}}{\Delta t} V_{b-1} dx, \\
 J_{a-1b} &= \int_{e_i} k \frac{d\phi_{a-1}}{dx} \frac{dV_b}{dx} dx + \int_{e_i} p \frac{\phi_{a-1}}{\Delta t} V_b dx \\
 J_{ab-1} &= \int_{e_i} k \frac{d\phi_a}{dx} \frac{dV_{b-1}}{dx} dx + \int_{e_i} p \frac{\phi_a}{\Delta t} V_{b-1} dx, \\
 J_{ab} &= \int_{e_i} k \frac{d\phi_a}{dx} \frac{dV_b}{dx} dx + \int_{e_i} p \frac{\phi_a}{\Delta t} V_b dx.
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

Ostatní prvky matice  $\mathbf{J}$  odpovídající elementu  $e_i$  jsou nulové, protože funkce  $\phi_i$  i  $V_i$  i jejich derivace jsou nulové. Matice  $\mathbf{J}$  bude v 1D vypadat následovně:

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} J_{11} & J_{12} & & & & & & & J_{1n-1} & J_{1n} \\ J_{21} & \ddots & & & & & & & & J_{2n} \\ & & \boxed{\begin{matrix} J_{i-2j-2} & J_{i-2j-1} \\ J_{i-1j-2} & 2J_{i-1j-1} & J_{i-1j} \end{matrix}} & & & & & & & \\ \vdots & & & \boxed{\begin{matrix} J_{ij-1} & 2J_{ij} & J_{ij+1} \end{matrix}} & & & & & \vdots & \\ & & & & \boxed{\begin{matrix} J_{i+1j} & K_{i+1j+1} \end{matrix}} & & & & & \\ J_{n-11} & & & & & & \ddots & & J_{n-1n} & \\ J_{n1} & J_{n2} & & & \dots & & J_{nm-1} & J_{nn} & & \end{pmatrix} \tag{3.12}$$

V matici (3.12) jsou šedě znázorněny a ohraničeny přilehlé elementy. Každý element vytvoří matici  $2 \times 2$ . Tyto malé matice se překrývají rohovým prvkem s maticemi sousedních elementů. Takto názorná je situace jen u 1D řešení, kde je indexace uzlů v diskretizačním schématu posloupná, vedle uzlu 5 je uzel 4 a 6. Řádky matice odpovídající těmto elementům jsou pak nad, resp. pod sebou. U 2D situace, která je rovněž zahrnuta v modelu, jsou k diskretizaci použity trojúhelníkové elementy (Kuráž, 2011), kde je situace s indexací a tedy i plnění matice složitější. Na obrázku 3.2a je ukázána diskretizace trojúhelníkovými elementy. Přerušovanou čarou jsou znázorněny testovací a bázové funkce uzlu se souřadnicemi  $x_i, y_i$ . Obrázek 3.2b ukazuje testovací a bázové funkce nad elementem  $e_i$ . Jak je vidět, indexace testovacích a bázových funkcí nad jedním elementem již není posloupná.

Pravá strana soustavy rovnic, vektor  $\mathbf{F}$ , vypadá po přičtení vektoru  $\mathbf{L}_p$  a okra-



Obrázek 3.2: Ukázka gain faktor modelu

jové podmínky pro  $b = 1, 2, \dots, n - r$  následovně

$$F_b = \int_{e_i} f V_b dx + \int_{e_i} p \frac{u_p}{\Delta t} V_b dx + \int_{\Gamma_{e_i}} \mathbf{q}_{\Gamma_n} V_b dx_{\Gamma}.$$

Neznámý vektor  $\mathbf{U}$  je v soustavě rovnic (3.10) vytknutím před integrály, „osamostatně“.

Nyní je soustava připravena

$$\mathbf{J}\mathbf{U} = \mathbf{F}, \quad (3.13)$$

kde  $\mathbf{U}$  je vektor aproximovaného řešení rovnice (3.3).

V následující podkapitole ukáži, jak je plněna lokální matice elementu pro 3 procesy řešení v modelu Nonorio et al. (1996a).

## 3.2 Aplikace metody konečných prvků na řídicí rovnice v modelu DRUtES

V modelu Nonorio et al. (1996a) jsou sdružené tři procesy: transport hmoty, teploty a rozpuštěné látky. V podkapitole 2.5.4 jsem nastínil, jak jsou procesy v modelu sdružené. V této části práce jsem ukázal, jak přesně je plněna matice elementu ve smyslu Galerkinovi metody konečných prvků popsané v předešlé podkapitole. Odvození slabých forem rovnic (2.43), (2.44) a (2.45) a aproximace řešení lineární kombinací bázových funkcí je ukázána v příloze A.1, A.2 a A.3.

Lokální matice jednoho elementu bude mít v tomto případě 9 částí. Smysl těchto částí byl již nastíněn v tabulce 2.4. Každá tato jednotka bude složena z matice o velikosti  $2 \times 2$  pro 1D řešení (ukázáno v předchozí podkapitole pro jednu rovnici) či  $3 \times 3$  pro 2D řešení. Pro přehlednost zůstanu u 1D problému ve svislém směru.

Mějme tedy lokální matici elementu  $e_i$  ve smyslu obrátku 3.1. Vliv vlhkosti na transport vlhkosti bude do matice zapsán podle předpisu

$$\mathbf{J}_{ab}^{e_i} = \int_{e_i} \left( S_s \frac{\theta}{n} + \frac{d\theta}{d\Psi} \right) \frac{\phi_a}{\Delta t} V_b dz + \int_{e_i} \left( \frac{K_{\Psi,l}}{\rho_l} + \frac{K_{\Psi,v}}{\rho_w} \right) \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \frac{\partial V_b}{\partial z} dz$$

pro  $a = i - 1, i; b = i - 1, i.$  (3.14)

Vliv teploty na transport vlhkosti bude do matice vypočten dle předpisu

$$\mathbf{J}_{ab+2}^{e_i} = \int_{e_i} \left( \frac{K_{T,l}}{\rho_l} + \frac{K_{T,v}}{\rho_w} \right) \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \frac{\partial V_b}{\partial z} dz$$

pro  $a = i - 1, i; b = i - 1, i$  (3.15)

a vliv koncentrace rozpuštěné látky na transport vlhkosti jako

$$\mathbf{J}_{ab+4}^{e_i} = \int_{e_i} \left( \frac{K_{c,l}}{\rho_l} + \frac{K_{c,v}}{\rho_w} \right) \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \frac{\partial V_b}{\partial z} dz$$

pro  $a = i - 1, i; b = i - 1, i.$  (3.16)

Pravá strana soustavy rovnic pro transport vlhkosti je

$$\mathbf{F}_b^{e_i} = \int_{e_i} \left( S_s \frac{\theta}{n} + \frac{d\theta}{d\Psi} \right) \frac{\Psi_p}{\Delta t} V_b dz - \int_{e_i} \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{K_{\Psi,l}}{\rho_l} \right) V_b dz$$

pro  $b = i - 1, i.$

Rovnice transportu teploty (2.44) je do lokální matice elementu  $e_i$  zapsána takto. Vliv teploty na transport tepla

$$\mathbf{J}_{a+2b+2}^{e_i} = \int_{e_i} C_{ps} \frac{\phi_a}{\Delta t} V_b dz + \int_{e_i} \lambda \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \frac{\partial V_b}{\partial z} dz + \int_{e_i} C_{pl} \mathbf{q}_l \frac{\partial \phi_a}{\partial z} V_b dz$$

pro  $a = i - 1, i; b = i - 1, i.$  (3.17)

Vliv vlhkosti na transport tepla

$$\mathbf{J}_{a+2b}^{e_i} = \int_{e_i} L_w K_{\Psi,v} \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \frac{\partial V_b}{\partial z} dz$$

pro  $a = i - 1, i; b = i - 1, i$  (3.18)

a vliv koncentrace mísitelné látky na transport tepla

$$\mathbf{J}_{a+2b+4}^{e_i} = \int_{e_i} L_w K_{c,v} \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \frac{\partial V_b}{\partial z} dz \quad \text{pro} \quad a = i - 1, i; b = i - 1, i. \quad (3.19)$$

Pravá strana soustavy rovnic pro transport tepla je tedy

$$\mathbf{F}_{b+2}^{e_i} = \int_{e_i} C_{ps} \frac{T_p}{\Delta t} V_b dz \quad \text{pro} \quad b = i - 1, i.$$

Nakonec přichází na řadu rovnice transportu mísitelné látky (2.45). V tomto případě rovnice sdružené členy nemá. Prvky  $\mathbf{J}_{a+4b}^{e_i}$  a  $\mathbf{J}_{a+4b+2}^{e_i}$  jsou pro  $a = i - 1, i$  a  $b = i - 1, i$  nulové. Vliv koncentrace mísitelné látky na vliv transportu mísitelné látky je vyjádřen takto:

$$\mathbf{J}_{a+4b+4}^{e_i} = \int_{e_i} \theta \rho_l \frac{\phi_a}{\Delta t} V_b dz + \int_{e_i} \theta \rho_l D \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \frac{\partial V_b}{\partial z} dz + \int_{e_i} \mathbf{q}_l \frac{\partial \phi_a}{\partial z} V_b dz \quad \text{pro} \quad a = i - 1, i; b = i - 1, i. \quad (3.20)$$

Pravá strana vypadá

$$\mathbf{F}_{b+4}^{e_i} = \int_{e_i} \theta \rho_l \frac{c_p}{\Delta t} V_b dz \quad \text{pro} \quad b = i - 1, i.$$

V této fázi je již vytvořena soustava lineárních rovnic (3.13), kde jsou prvky matice i vektoru pravé strany naplněny koeficienty odpovídající řídicím rovnicím. Tuto soustavu je nyní třeba vyřešit. V modelu DRUtES byly již dříve implementovány Gaussovy kvadraturní vzorce s volitelným počtem váhových bodů, pro vyřešení integrálů při plnění matice  $\mathbf{J}$  a vektoru  $\mathbf{F}$ . Samotná soustava je řešena metodou sdružených gradientů. Nelinearita problému vyžaduje iterační řešení. V modelu je použito Picardovo iterační schéma. Metoda sdružených gradientů i Picardovo iterační schéma byli již v kódu modelu DRUtES implementovány (Kuráž, 2011).

# Kapitola 4

## Implementace

V této části práce jsem popsal, jakým způsobem jsem implementoval teorii popsanou v kapitole 2 do modelu DRU $\tau$ ES. Model DRU $\tau$ ES byl původně vytvořen jako součást disertační práce doc. Ing. Michal Kuráž, Ph.D. (Kuráž, 2011).

Zdrojový kód byl napsán v jazyce `fortran` verze 95. Je kompatibilní s platformou operačního systému GNU/Linux.

Výpočetní část modelu byla vytvořena k řešení obecné soustavu  $N$  sdružených advektivně disperzně reakčních rovnic pomocí Galerkinovy metody konečných prvků v 1 a 2D. Praktickou částí této práce bylo zapsat členy elasticity, advektivní a disperzní členy řídicích rovnic popsaných v kapitole 3.2 a funkcí jednotlivých parametrů do kódu modelu DRU $\tau$ ES a napojit je na výpočetní část modelu. Dále pak vytvořit konfigurační soubory a podprogramy k jejich správnému načtení do datových struktur modelu. Ve schématu na obrázku 4.1 je ukázán adresářový strom modelu. Černě jsou v něm vyznačeny adresáře, které jsem přidal či upravil v průběhu praktické části této diplomové práce. Na obrázcích 4.2 a 4.3 jsou ukázány a stručně popsány soubory v adresářích vytvořených v rámci této diplomové práce.

Během vytváření zdrojového kódu jsem musel udělat několik drobnějších úprav i v jiných částech kódu než těch, které jsou vyznačeny na schématech 4.1, 4.2 a 4.3. Šlo spíše o drobnější úpravy, proto se o nich více než těmito dvěma větami nebudu zmiňovat.



# Kapitola 5

## Kontrola modelu

Po teoretickém popisu modelu a po vysvětlení řešení daného problému je v této kapitole prezentována řada řešení. V této části práce bych rád ukázal řešení, na nichž jsem ověřil správnost implementace sdruženého modelu do modelu DRU- $\tau$ ES. Nonorio et al. (1996a) porovnával model s analytickým řešením daných rovnic a měřenými daty. Měřená data jsem při této práci neměl k dispozici, proto jsem numerické řešení porovnal pouze s analytickým řešením. Nejprve jsou v této kapitole ukázána řešení jednotlivých procesů při zanedbání ostatních. Transport vlhkosti je porovnán s Philipovým semi-analytickým řešením Richardsovy rovnice v difuzním tvaru. Toto řešení jsem v následujícím textu i odvodil. Transport tepla a mísitelné látky jsem porovnal s 2D řešením obecné advekčně-disperzní rovnice. Nakonec jsem v této kapitole ukázal řešení sdruženého transportu.

### 5.1 Kontrola toku vlhkosti

Tok vlhkosti jsem porovnal s Philipovým semi-analytickým řešením Richardsovy rovnice v difuzním tvaru. John R. Philip byl poměrně významný hydrolog 20. století. Publikoval množství vědeckých článků zabývajících se zejména infiltrací. Toto řešení bylo třeba pro účely této práce vytvořit. Proto jsem jej v textu popsal.



### 5.1.1 Philipsovo řešení Richardsovy rovnice

Semi-analytické řešení Richardsovy rovnice odvodil na přelomu padesátých a šedesátých let 20. století Philip v sérii článků zabývajících se infiltrací do půdního profilu. Pro účely této práce jej popíšu pomocí Kirkham & Powers (1972) a Kutílek (1975). K samotnému výpočtu jsem použil algoritmický postup popsany v původních Philipsových publikacích (Philip, 1955, str. 888) a (Philip, 1957a, str. 36). Klíčovým v tomto řešení je Boltzmannova transformace. Ta je platná pro obecnou difuzní rovnici. Tedy i pro Richardsovu rovnici v horizontálním směru, kde je zanedbán vliv gravitace. Díky ní je parciální diferenciální Richardsova rovnice bez vlivu gravitace transformována na obyčejnou diferenciální rovnici. Tuto transformaci lze zapsat jako

$$\lambda(\theta) = xt^{-1/2}, \quad (5.1)$$

kde  $x$  je vzdálenost od vstupu do půdního profilu a  $t$  je čas, po který je voda ze vstupu infiltrována do profilu. Tato transformace uvažuje nekonečně dlouhý profil, neboť je zde zavedena vzdálenost od vstupu vlhkosti teoreticky až do nekonečna. Pokud najdeme pozice, kde je stejná hodnota objemové vlhkosti  $\theta$ , je součin  $xt^{-1/2}$  konstantní. Neznámá funkce  $\lambda$  bude platná i pro nekonstantní hodnotu difuzivity a tedy bude různá pro různé půdy.

Philip tedy nejprve použil Boltzmannovu transformaci na Richardsovu rovnici v horizontálním profilu, tedy se zanedbáním vlivu gravitace

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \quad (5.2)$$

s okrajovou<sup>1</sup> a počáteční podmínkou  $\theta_0$  a  $\theta_i$

$$\begin{aligned} \theta &= \theta_0 & \text{pro} & \quad x = 0 \text{ a } t > 0, \\ \theta &= \theta_i & \text{pro} & \quad x > 0 \text{ a } t = 0. \end{aligned}$$

Po aplikaci řetězového pravidla na rovnici (5.1) a její substituci do rovnice (5.2)

<sup>1</sup>Je zde uvažována jen jedna podmínka, protože se jedná nekonečně dlouhý profil.

získáme rovnici, kde je již jediná neznámá funkce  $\lambda$  o jedné proměnné  $\theta$

$$\int_{\theta_i}^{\theta} \lambda d\theta = -2D(\theta) \frac{d\theta}{d\lambda} \quad (5.3)$$

a okrajové podmínky

$$\begin{aligned} \theta &= \theta_0 & \text{pro} & \lambda = 0, \\ \theta &= \theta_i & \text{pro} & \lambda = \infty. \end{aligned}$$

Rovnice (5.3) je následně řešena iteračním postupem popsáním v (Philip, 1955, str. 888). Toto řešení je plně validní pro horizontální problém. Pro validaci modelu implementovaném v této práci je třeba znát vlhkost ve vertikálním profilu. I v tom případě Philip nejprve vycházel z Richardsovy rovnice se zanedbáním vlivu gravitace. Fyzikálně taková rovnice řeší pouze změny vlhkosti vlivem adsorbce vlhkosti půdou. V rovnici (5.2) pak nahradil  $x$  aproximovaným řešením  $x'$ . Přesné řešení  $z$  (již se pohybujeme ve vertikální dimenzi) lze tedy obdržet jako součet

$$z = x' + y,$$

kde  $y$  je chyba aproximovaného řešení, která vzniká zanedbáním vlivu gravitace ve vertikálním profilu. Philipsovo řešení následně substituuje tuto chybu  $y = z - x'$  do plné difuzní Richardsovy rovnice, která má pak tvar

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \theta} \left( D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x'} \frac{\partial y}{\partial z} \right) + \frac{\partial K}{\partial \theta}.$$

Přesné řešení této rovnice je opět neznámé, proto Philip dále aproximoval  $y$  přibližným řešením  $y'$ , kde následně bude platit pro přesné řešení, že

$$y = y' + n,$$

kde  $n$  je chyba přibližného řešení  $y'$ , které je vyjádřením chyby  $y$  přesného řešení  $z$ . Chybu  $n = y - y'$  Philip opět vyjádřil její substitucí do Richardsovy rovnice, která pak vypadá následovně

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \theta} \left( D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x'} \left( \frac{\partial n}{\partial z} - \frac{\partial y'}{\partial x'} \frac{\partial y}{\partial z} \right) \right).$$

Jak je vidět, tento postup se cyklí, jak se Philip snažil přibližně vyjádřit chybu chyby předchozí. Řešení  $n$  bude opět vyjádřené jako  $n = n' + w$ , bude pak hledáno řešení rovnice  $n' = n - w$ , kde bude chyba  $w$  aproximována jako  $w' = w + \epsilon$ . Pokud tyto chyby chyb vrátíme do původního řešení  $z$ , bude  $z$  vypadat

$$z = x' + y' + n' + w' + \epsilon. \quad (5.4)$$

Jak bylo ukázáno na začátku této podkapitoly a jak je ukázáno ve vzorci (5.1), Boltzmannovou transformací lze vyjádřit  $x'$  jako

$$x' = \lambda(\theta)xt^{1/2},$$

kde  $\lambda$  je řešení transformované Richardsovy rovnice, rovnice (5.3). Obdobě Philip odvodil transformace pro další členy vztahu (5.4). Příslušné transformace a jejich rovnice vypadají následně:

$$\begin{aligned} y' = \chi t & \quad \text{a rovnice} & \quad \int_{\theta_i}^{\theta} \chi d\theta &= P \frac{d\chi}{d\theta} + (K - K_i), \\ n' = \psi t^{3/2} & \quad \text{a rovnice} & \quad \frac{3}{2} \int_{\theta_i}^{\theta} \psi d\theta &= P \frac{d\psi}{d\theta} - D \frac{d\theta}{d\lambda} \left( \frac{\partial \chi}{\partial \lambda} \right)^2, \\ & & &= P \frac{d\psi}{d\theta} - Q(\theta), \\ w' = \omega t^2 & \quad \text{a rovnice} & \quad 2 \int_{\theta_i}^{\theta} \omega d\theta &= P \frac{d\omega}{d\theta} - D \frac{d\theta}{d\lambda} \frac{d\chi}{d\lambda} \left( 2 \frac{d\psi}{d\lambda} - \left( \frac{d\chi}{d\lambda} \right)^2 \right), \\ & & &= P \frac{d\psi}{d\theta} - Q(\theta) \left( 2 \frac{d\psi}{d\lambda} - \frac{d\chi}{d\lambda} \right), \\ & & \quad \vdots & \\ f' = f_m(\theta)xt^{m/2} & \quad \text{a rovnice} & \quad \frac{m}{2} \int_{\theta_i}^{\theta} f_m d\theta &= P \frac{df_m}{d\theta} - R_m, \end{aligned}$$

kde  $P = D \left( \frac{d\theta}{d\lambda} \right)^2$  a  $m$  vyjadřuje počet následně vyjádřených chyb. Na pravé straně rovnic, od transformace  $n'$  dále, je vidět zanoření transformací předchozích. Řešení rovnic pro  $y'$ ,  $n'$ ,  $w'$  jsou ukázána jako řešení obecného  $f'$  v (Philip, 1957a, str. 36).

Neznámé jsou v těchto rovnicích  $\lambda$ ,  $\chi$ ,  $\psi$ ,  $\omega$  a  $f_m$  a všechny jsou závislé pouze na  $\theta$ . Řešení  $z(\theta, t)$  (5.4) tedy je

$$z(\theta, t) = \lambda(\theta)t^{1/2} + \chi(\theta)t + \psi(\theta)t^{3/2} + \omega(\theta)t^2 + \dots + f_m(\theta)t^{m/2} \quad (5.5)$$

Řešením rovnice (5.5) pak získáme vzdálenost dané objemové vlhkosti  $\theta$  od vstu-

pu do profilu v čase  $t$ . V článku Philip (1957b) použil Philip zanoření do čtvrté úrovně. Pro účely této práce jsem tedy postupoval obdobně.

### 5.1.2 Srovnání Philipsova a numerického řešení

Jak jsem zmínil na začátku této kapitoly, nejprve jsem porovnal jednotlivé procesy s jejich analytickým řešením. Zde je srovnáno Philipsovo řešení Richardsovy rovnice a vlhkostními profily získanými modelem DRU<sub>t</sub>ES. Příslušné hodnoty hydraulických parametrů byly převedeny na vhodné jednotky. Philipsovo semi-analytické řešení řeší Richardsovu rovnici v difuzním tvaru. Příslušná tlaková výška, která je třeba k odvození difuzivity  $D(\theta) = K(\theta)\frac{\partial h}{\partial \theta}$ , je u Philipsova řešení v délkových jednotkách. V případě tohoto modelu a rovnice (2.43) je řešením potenciál v energetických jednotkách  $J.kg^{-1}$  (resp.  $m^2.s^{-2}$ ). Richardsova rovnice řešená dle Philipse se od rovnice (2.43) rovněž liší tím, že rovnice (2.43) řeší transport vlhkosti jakožto součet plynné a kapalně fáze. Řešení „klasické“ Richardsovy rovnice zahrnuje pouze kapalnou fázi. Tato odlišnost je rovněž zohledněna ve vstupních parametrech, které musí být v příslušných jednotkách. Parametry jsou ukázány v tabulce 5.1.

V modelu DRU<sub>t</sub>ES byla již dříve implementovaná Richardsova rovnice v kapacitním tvaru, kde je řešením tlaková výška v délkových jednotkách. Je tedy více podobná Philipsovu řešení. Na obrázku 5.1 jsem proto ukázal i toto řešení, a to spíše kvůli kontrole Philipsova řešení, které jsem pro účely této práce rovněž naprogramoval.

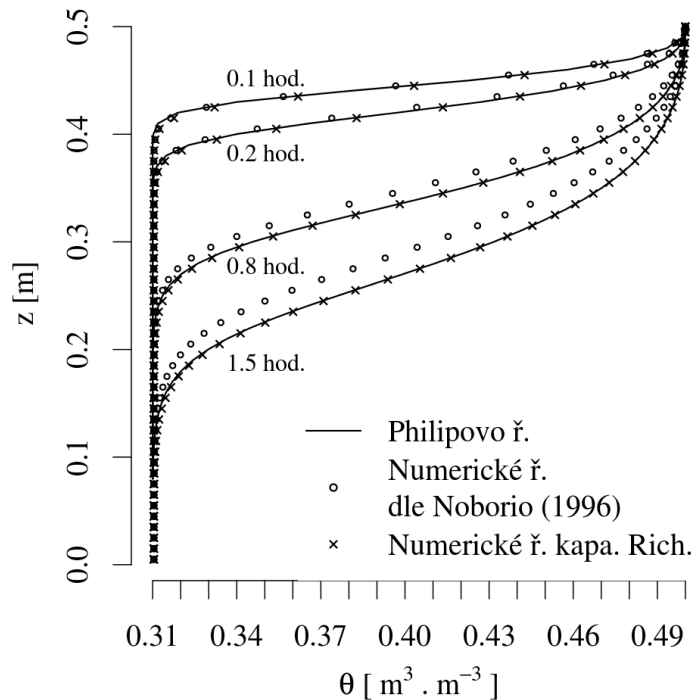
Philipsovo řešení si žádá jen jednu okrajovou podmínku, a to stav na horním konci půdního profilu. V modelu DRU<sub>t</sub>ES jsem nastavil horní okrajovou podmínku jako Dirichletovu a na dolní okrajové podmínce nulovou Neumannovu okrajovou podmínku, tedy nulový tok. Horní okrajová podmínka měla hodnotu  $\theta = 0.5$  u obou řešení. Hodnoty parametrů konstitučních vztahů jsem již ukázal v tabulkách 2.3 a 5.1. Vlhkostní profily jsou zobrazeny ve 4 časech:  $t_1 = 0.1$ ,  $t_2 = 0.2$ ,  $t_3 = 0.8$ ,  $t_4 = 1.5$  hodin. Dálka řešené oblasti byla nastavena na  $0.5 m$ , délka kroku prostorové diskretizace byla  $0.001 m$ .

Všechna řešení jsou ukázána na obrátku 5.1. Jak je vidět, Philipsovo řešení

**Tabulka 5.1:** Hydraulické parametry Philipsova a numerického řešení 1D Richardsovi rovnice; DRUtES<sub>kapa. Rich.</sub> je Richardsova rovnice v kapacitním tvaru, DRUtES<sub>Noborio</sub> je rovnice (2.43)

|                             | Philip      | DRUtES <sub>kapa. Rich.</sub> |                             | DRUtES <sub>Noborio</sub> |
|-----------------------------|-------------|-------------------------------|-----------------------------|---------------------------|
| $\alpha$ [ $1.m^{-1}$ ]     | 1.0         | 1.0                           | $\alpha$ [ $s^2.m^{-2}$ ]   | 0.1019368                 |
| $n$ [-]                     | 2.5         | 2.5                           | $n$ [-]                     | 2.5                       |
| $m$ [-]                     | 0.8         | 0.8                           | $m$ [-]                     | 0.8                       |
| $\theta_s$ [ $m^3.m^{-3}$ ] | 0.5         | 0.5                           | $\theta_s$ [ $m^3.m^{-3}$ ] | 0.5                       |
| $\theta_r$ [ $m^3.m^{-3}$ ] | 0.005       | 0.005                         | $\theta_r$ [ $m^3.m^{-3}$ ] | 0.005                     |
| $S_s$ [ $1.m^{-1}$ ]        | —           | 0.0                           | $S_s$ [ $s^2.m^{-2}$ ]      | 0.0                       |
| $K_s$ [ $m.s^{-1}$ ]        | 1.388889e-6 | 1.388889e-6                   | $K_s$ [ $kg.s.m^{-3}$ ]     | 0.00014162                |

a řešení Richardsovy rovnice v kapacitním tvaru jsou velmi podobná. Jsou takto porovnána porovnatelná řešení a dokazuje to, že Philipsovým řešením bylo připraveno správně. Řešení Richardsovy rovnice ve tvaru (2.43) se v čase za Philipsovo řešení opožďuje. Rovnice (2.43) ovšem nemá zcela stejnou formu jako rovnice řešená Philipsem. Objektívni funkce Nash-Sutcliffe (NS) a odmocnina sumy čtverců residuí (RMSE) ukázané v tabulce 5.2 značí, že přinejmenším v prvních 3 časech je podobnost řešení dobrá.



**Obrázek 5.1:** Numerické a Philipsovo řešení vlhkostního profilu

**Tabulka 5.2:** Objektivní funkce: odmocnina sumy čtverců residuí (RMSE), Nash-Sutcliffe koeficient (NS)

| Časy     | RMSE    | NS      |
|----------|---------|---------|
| 0.1 hod. | 0.0013  | 0.99948 |
| 0.2 hod. | 0.00231 | 0.99869 |
| 0.8 hod. | 0.00704 | 0.99174 |
| 1.5 hod. | 0.01089 | 0.98103 |

## 5.2 Kontrola toku tepla

Tok tepla jsem opět porovnal s analytickým řešením, tentokrát advekčně disperzní rovnicí. Dle Nonorio et al. (1996a) jsem použil následující analytické řešení<sup>2</sup>

$$\begin{aligned}
P(z, x, t) = P_i + \frac{(P_0 - P_i)z}{4\sqrt{\pi B_z}} \exp\left(\frac{E_z \mathbf{q}_l z}{2B_z}\right) \int_0^{t/A} & \\
\exp\left(-\frac{(E_z \mathbf{q}_l z)^2}{4B_z} \tau - \frac{z^2}{4B_z \tau}\right) \tau^{-3/2} & \\
\left(\operatorname{erf}\left(\frac{a-x}{2\sqrt{B_x \tau}} + \frac{E_x \mathbf{q}_l x}{2} \sqrt{\frac{\tau}{B_x}}\right) & \right. \\
\left. \operatorname{erf}\left(\frac{a+x}{2\sqrt{B_x \tau}} - \frac{E_x \mathbf{q}_l x}{2} \sqrt{\frac{\tau}{B_x}}\right)\right) d\tau &
\end{aligned} \tag{5.6}$$

s okrajovými podmínkami

$$\begin{aligned}
P(0, x, t) = P_0 \quad \text{pro} \quad -a \leq x \leq a \\
P(0, x, t) = P_i \quad \text{pro} \quad x \leq -a \text{ a pro } a \leq x \\
\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial P}{\partial x} = 0 \\
\lim_{z \rightarrow \infty} \frac{\partial P}{\partial z} = 0.
\end{aligned} \tag{5.7}$$

Jako  $P$  je označena daná počítaná veličina, v tomto případě teplo<sup>3</sup>.  $P_0$  je okrajová podmínka a  $P_i$  je počáteční podmínka. Jak je vidět, v (5.7)  $P_i$  rovněž zastává úlohu okrajové podmínky na zbytku okraje, kde není definována  $P_0$ . Hodnota  $a$  určuje šířku okrajové podmínky okolo svislé osy. Okrajová podmínka rovnice (5.6) je tedy souměrná podle svislé osy  $z$ . Koeficienty  $A$ ,  $B_x$ ,  $B_z$ ,  $E_x$ ,  $E_z$  jsou dosazeny ve smyslu rovnice pro proudění tepla (2.44). Koeficient  $A$  odpovídá objemové tepelné kapacitě  $C_s$ ,  $B_x$  a  $B_y$  tepelné vodivosti půdního prostředí  $\lambda^*$ ,  $E_x$  a  $E_x$

<sup>2</sup>Toto řešení nebudu tentokrát odvozovat, jeho význam není takový jako Philipsovo řešení detailně popsané v podkapitole 5.1.1.

<sup>3</sup>Tato rovnice bude rovněž použita pro výpočet koncentrace viz níže.

specifickému teplu vody obsahující rozpuštěnou látku  $C_l$ . Toto analytické řešení reprezentuje nekonečně dlouhá oblast, dolní okrajovou podmínku má tedy v nekonečnu, kde se limitně blíží nulové Neumannově okrajové podmínce. V tomto řešení je zahrnut difuzní i konvekční tok tepla. Konvekci zde reprezentuje pouze gravitační tok vlhkosti. K vyřešení rovnice (5.6) s okrajovými podmínkami (5.7) jsem použil funkce balíčku R (R Core Team, 2013). Hodnoty  $A$ ,  $B_x$ ,  $B_z$ ,  $E_x$ ,  $E_z$  jsou ukázány v tabulce 5.3.

**Tabulka 5.3:** Hodnoty parametrů řídicí rovnice toku tepla.

| Označení                                    | Hodnota                                     | Jednotky                 |
|---|---|--------------------------|
| $A = C_s$                                   | $= 3.01 \cdot 10^{-6}$                      | $[J.m^{-3}.K^{-1}]$      |
| $B_z = B_x = \lambda^*$                     | $= 2.2278$                                  | $[W.m^{-1}.K^{-1}]$      |
| $E_z \mathbf{q}_{lz} = C_l \mathbf{q}_{lz}$ | $= 186.02$                                  | $[J.m^{-2}s^{-1}K^{-1}]$ |
| $E_x \mathbf{q}_{lx} = C_l \mathbf{q}_{lx}$ | $= 0$                                       | $[J.m^{-2}s^{-1}K^{-1}]$ |
| Označení                                    | Funkční předpis                             | Jednotky                 |
| $C_l$                                       | $= 4180(0.730 + 0.270 \exp(-0.268c_{mol}))$ | $[J.kg^{-1}K^{-1}]$      |
| $L_w$                                       | $= 2.501 \cdot 10^6 - 2369.2T_C$            | $[J.kg^{-1}K^{-1}]$      |

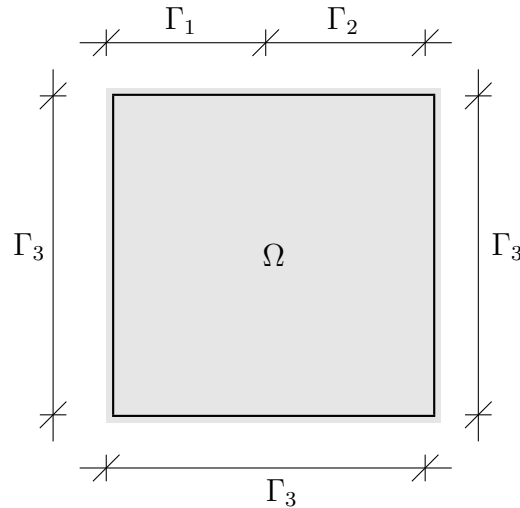
Jak již bylo řečeno, analytické řešení (5.6) bere v úvahu pouze gravitační tok půdní vody. Abych docílil tohoto kritéria, zvolil jsem řešení ve zcela nasyceném prostředí. Touto volbou lze docílit toho, že vliv toku půdních par, konstituční člen  $K_{\Psi v}$ , je nulový a tok kapalně fáze je řízen pouze gravitační silou, protože gradient tlakové výšky je všude na oblasti rovněž nulový. V tomto případě musíme volit nasycenou hydraulickou vodivost takovou, aby odpovídala hodnotě  $E_z \mathbf{q}_{lz} = C_l \mathbf{q}_{lz} = 186.02$  použité v Nonorio et al. (1996a), v tomto případě hodnota  $K_s = 0.04445 kg.s^{-1}.m^{-3}$  (pokud je koncentrace mísitelné látky nulová).

Okrajové podmínky řešené oblasti  $\Omega$  jsou znázorněny na obrázku 5.2. Počáteční a okrajové podmínky  $\Gamma_1$  a  $\Gamma_2$  toku vlhkosti jsou nastaveny na  $h = 0 m^2.s^{-2}$ . Okrajová podmínka  $\Gamma_3$  na nulový tok. Počáteční a všechny okrajové podmínky toku mísitelné látky byly nastaveny na koncentraci  $c = 0.0 kg/kg$ . Hodnoty počátečních a okrajových podmínek toku tepla numerického a analytického řešení

jsou

$$\begin{aligned}
 T(z, x, 0) &= P_i = 298.15 \text{ K} && \text{pro } \forall z \wedge \forall x \in \Omega \text{ a pro } t = 0, \\
 T(z, x, t) &= P_0 = 303.15 \text{ K} && \text{pro } \forall z \wedge \forall x \in \Gamma_1 \text{ a pro } t > 0, \\
 T(z, x, t) &= P_i = 298.15 \text{ K} && \text{pro } \forall z \wedge \forall x \in \Gamma_2 \text{ a pro } t > 0, \\
 \frac{\partial T(z, x, t)}{\partial z} &= \frac{\partial T(z, x, t)}{\partial y} = 0.0 \text{ W} && \text{pro } \forall z \wedge \forall x \in \Gamma_3 \text{ a pro } t > 0.
 \end{aligned}$$

Ostatní hodnoty potřebné k výpočtu, tedy hodnoty parametrů konstitučních vztahů a hydraulických charakteristik, jsou v tabulce 2.3 a 5.1. K diskretizaci výpočetní oblasti jsem použil nepravidelnou výpočetní síť. Výpočetní síť je „hustší“ v blízkosti horní okrajové podmínky. K vytvoření této sítě jsem použil program T3D (Rypl, 2002). Na horní okrajové podmínce  $\Gamma_1$  jsem nastavil diskretizační krok  $0.005 \text{ m}$ , na ostatních okrajových podmínkách a na zbytku oblasti na  $0.01 \text{ m}$ . Vygenerováním sítě programem T3D se diskretizační krok interpoluje přes celou oblast  $\Omega$ . Ukázka diskretizačního schéma a řešení v čase  $t = 2 \text{ h}$  jsou ukázány v příloze A.6. Časový krok výpočtu byl nastaven v intervalu  $0.02$  až  $22$  sekundy s konečným časem  $2$  hodin.

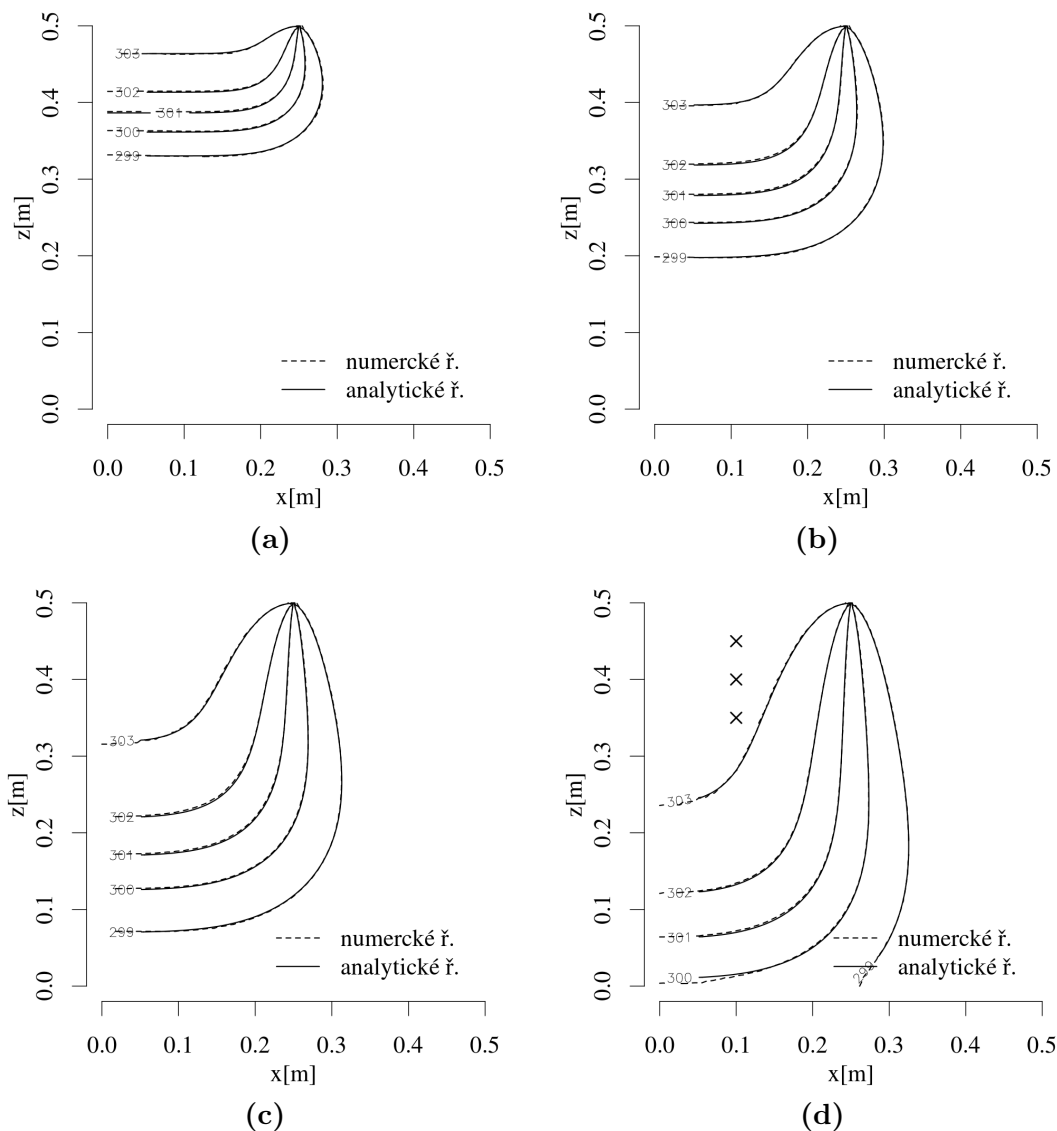


**Obrázek 5.2:** Okrajové podmínky

Na obrázku 5.3 jsou ukázány výsledky v časech  $0.5$ ,  $1.0$ ,  $1.5$  a  $2.0$  hodiny. Výsledky jsou znázorněny jako isolinie se stejnou teplotou v hladinách  $299$ ,  $300$ ,  $301$ ,  $302$ ,  $303 \text{ K}$ . Numerické řešení ve všech časech ukazuje dobrou shodu s analytickým řešením, isolinie se velmi dobře překrývají. Kvantitativně je numerické



a analytické řešení porovnáno v tabulce 5.4 objektivními funkcemi NS a RMSE. I toto srovnání ukázalo dobrou shodu, ve všech časech je RMSE přibližně stejně velké.



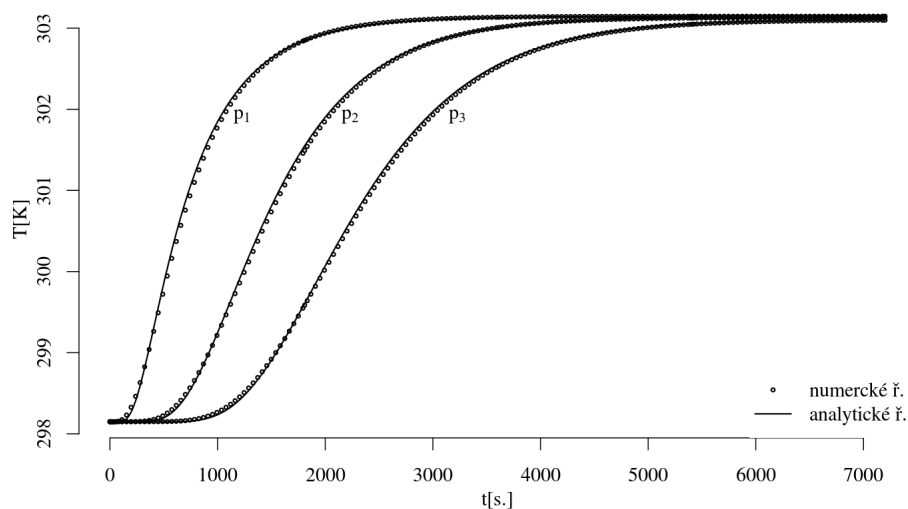
**Obrázek 5.3:** Analytické a numerické řešení rovnice transportu tepla v časech: (a) 0.5, (b) 1.0, (c) 1.5 a (d) 2.0 hodiny; teplota je ukázána v  $K$ ; na obrázku (d) jsou vyznačeny body  $p_1$ ,  $p_2$  a  $p_3$  (číslované od shora dolů), kde je ukázán časový průběh změn teploty

**Tabulka 5.4:** Objektivní funkce: odmocnina sumy čtverců residuí (RMSE), Nash-Sutcliffe koeficient (NS)

| Časy     | RMSE   | NS    |
|----------|--------|-------|
| 0.5 hod. | 0.0243 | 0.999 |
| 1.0 hod. | 0.0230 | 0.999 |
| 1.5 hod. | 0.0241 | 0.999 |
| 2.0 hod. | 0.0256 | 0.999 |

Pro doplnění informace jsem ukázal časové průběhy výsledků v určitých mís-

tech řešené oblasti. Zvolil jsem 3 body v levé horní části oblasti, tam, kde dochází k toku tepla. Souřadnice  $x$  a  $z$  bodů byly:  $p_1 = [0.1, 0.45]$ ,  $p_2 = [0.1, 0.4]$  a  $p_3 = [0.1, 0.35]$ . Pozice těchto bodů jsou vyznačeny na obrázku 5.3d. Výsledek numerického řešení porovnaný s analytickým řešením je ukázán na obrázku 5.4 a objektivní funkce v tabulce 5.5. Zde jsou výsledky výpočtů podobné. Teplota ve všech bodech začala stoupat rychleji u numerického řešení. Její zvyšování však bylo s postupujícím časem pomalejší než zvyšování teploty. Přesto se výsledky dobře schodují.



**Obrázek 5.4:** Numerické a Philipsovo řešení vlhkostního profilu

**Tabulka 5.5:** Objektivní funkce: odmocnina sumy čtverců residuí (RMSE), Nash-Sutcliffe koeficient (NS)

| Bod   | RMSE   | NS    |
|-------|--------|-------|
| $p_1$ | 0.0295 | 0.999 |
| $p_2$ | 0.0250 | 0.999 |
| $p_3$ | 0.0223 | 0.999 |

## 5.3 Kontrola toku mísitelné látky

Numerické řešení šíření mísitelné látky na oblasti jsem porovnal se stejným řešením advekčně disperzní rovnice jako řešení toku tepla v předchozí kapitole, tedy rovnicí (5.6) s okrajovými podmínkami (5.7). Koeficienty rovnice (5.6) byly pochopitelně jiné a jsou ukázány v tabulce 5.6.

**Tabulka 5.6:** Hodnoty parametrů analytického řešení a řídicí rovnice toku mísitelné látky

| Označení                          | Hodnota                              | Jednotky             |
|-----------------------------------|--------------------------------------|----------------------|
| $A = \theta\rho_l$                | $= 0.5 \rho_l(T, c)$                 | $[kg.m^{-3}]$        |
| $B_z = B_x = \theta\rho_l D$      | $= 0.5 \rho_l(T, c) 6 \cdot 10^{-6}$ | $[m^2.s^{-1}]$       |
| $E_z \mathbf{q}_z = \mathbf{q}_z$ | $= 0.0014$                           | $[kg.m^{-2}.s^{-1}]$ |
| $E_x \mathbf{q}_x = \mathbf{q}_x$ | $= 0$                                | $[kg.m^{-2}.s^{-1}]$ |
| Označení                          | Funkční předpis                      | Jednotky             |
| $\rho_l$                          | $=$ rovnice (2.12)                   | $[kg.m^{-3}]$        |

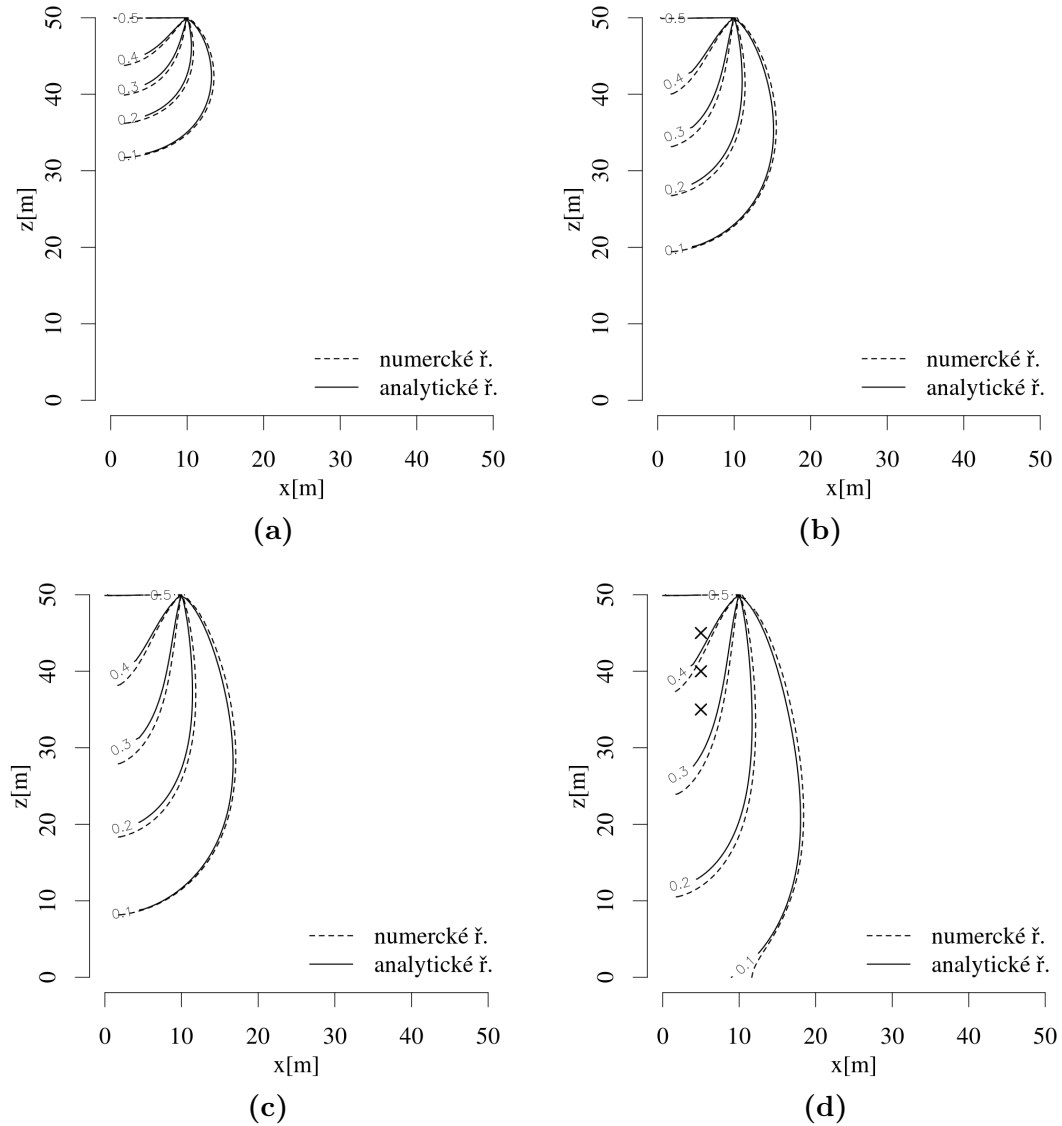
V tabulce 5.6 není zadána hodnota hustoty roztoku mísitelné látky  $\rho_l(T, c)$ , v tomto případě *NaCl*. Tato hustota se významně liší při různých hodnotách koncentrace. Okrajová podmínka  $P_0$  u analytického a  $\Gamma_1$  u numerického řešení je nastavena na koncentraci  $0.5^4 kg.kg^{-1}$ . Počáteční a ostatní okrajové podmínky u obou řešení mají nulovou hodnotu koncentrace. To způsobuje velký rozptyl hustoty  $\rho_l(T, c)$  takového roztoku. Hustota roztoku na okraji  $\Gamma_1$  má při teplotě  $277.15 K$  hodnotu  $\rho_l(277.15, 0.5) = 1339.03 kg.m^{-3}$ . Hustota počáteční podmínky je  $\rho_l(277.15, 0) = 1000.00 kg.m^{-3}$ . Do analytického řešení jsem tedy vždy zadal hustotu určité isolinie řešení numerického a teprve pak je porovnal. Analytické řešení je pak kompilátem několika řešení s hustotami:  $\rho_l(277.15, 0.1)$ ,  $\rho_l(277.15, 0.2)$ ,  $\rho_l(277.15, 0.3)$ ,  $\rho_l(277.15, 0.4)$  a  $\rho_l(277.15, 0.5)$ .

Počáteční a okrajové podmínky potenciálu na všech okrajích byly nastaveny na  $h = 0 m^2.s^{-1}$ . Počáteční a okrajové podmínky tepla na  $T = 277.15 K$ . Diskretizace zůstala podobná předchozímu případu. Oblast  $\Gamma$  i diskretizace je pouze 100 krát větší. Konečný čas výpočtu byl 200 dní s maximálním časovým krokem 10 dní.

Výsledky této kontroly jsou ukázány na obrázku 5.5. Na všech grafech je vidět, že numerické řešení „předbíhá“ analytické. Numerické řešení při koncen-

<sup>4</sup>Koncentrace  $0.5 kg.kg^{-1}$  je maximální koncentrace jakou lze modelem počítat. Implementovaná funkce hustoty roztoku NaCl (vztah (2.12)) má v 0.5 své maximum a následně prudce klesá až do velmi záporných hodnot.

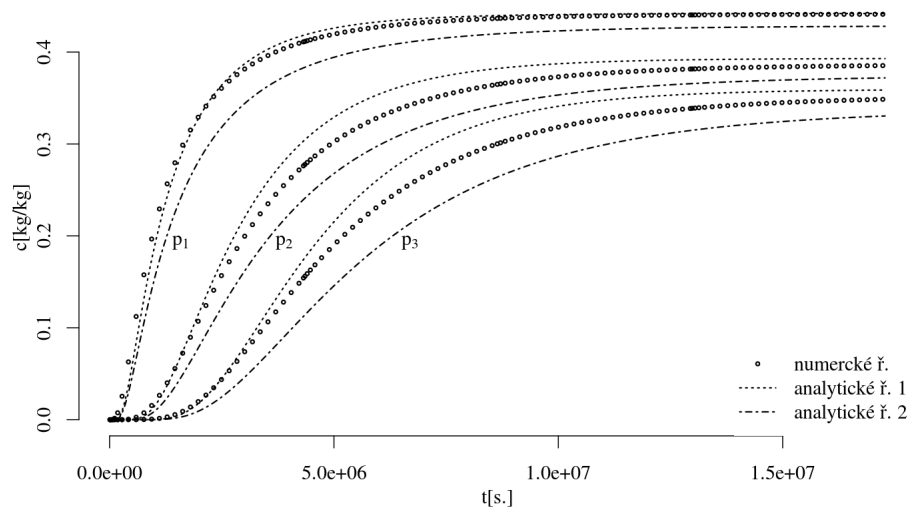
traci  $0.1 \text{ kg.kg}^{-1}$  se ve všech pozorovaných časech nejvíce blíží analytickému. Vzhledem k tomu, že obrázky 5.5 jsou kompilátem několika analytických řešení, nelze tato řešení porovnat kvantitativně.



**Obrázek 5.5:** Analytické a numerické řešení rovnice transportu mísitelné látky v časech: (a) 50, (b) 100, (c) 150 a (d) 200 dní; na obrázku (d) jsou ukázány body  $p_1$ ,  $p_2$  a  $p_3$  (číslované od shora dolů), kde je ukázán časový průběh změn koncentrace

Stejně jako v předchozím případě jsou na obrázku 5.6 ukázány časové průběhy koncentrace mísitelné látky v bodech  $p_1$ ,  $p_2$  a  $p_3$ , jejichž poloha je vyznačena na obrázku 5.5d. Jejich přesné souřadnice jsou:  $p_1 = [2.0, 47.5]$ ,  $p_2 = [2.0, 45.0]$  a  $p_3 = [2.0, 40.0]$ . Na obrázku jsem ukázal řešení numerické a dvě řešení analytická. I zde je problém s vysoce proměnlivou hodnotou hustoty solného roztoku  $\rho_l$ . Proto jsem na obrázku 5.6 vykreslil analytické řešení s koncentrací  $0.1 \text{ kg.kg}^{-1}$  (analytické řešení 1) a koncentrací  $0.5 \text{ kg.kg}^{-1}$  (analytické řešení 2). V takovém

případě by mělo být numerické řešení menší než analytické řešení 1 dokud nedosáhne koncentrace 0.1. Se zvyšující se koncentrací by se mělo numerické řešení čím dál více podobat analytickému řešení 2. Takovému chování odpovídá nejlépe průběh koncentrace v bodě  $p_1$ , kde koncentrace dosáhla v konečném čase výpočtu nejvyšších hodnot. Kvantitativní porovnání jsem ukázal v tabulce 5.7. I když není takové porovnání zcela přesné, můžeme říci, že dané objektivní funkce dávají dobré výsledky.



**Obrázek 5.6:** Časový průběh numerického a analytického řešení transportu mísitelné látky v bodech  $p_1$ ,  $p_2$  a  $p_3$ ; analytické ř. 1 je výsledky při koncentraci  $0.1 \text{ kg.kg}^{-1}$ , analytické ř. 2 je výsledky při koncentraci  $0.5 \text{ kg.kg}^{-1}$

**Tabulka 5.7:** Objektivní funkce: odmocnina sumy čtverců residuí (RMSE), Nash-Sutcliffe koeficient (NS)

| Bod   | RMSE <sup>(1)</sup> | NS <sup>(1)</sup> | RMSE <sup>(2)</sup> | NS <sup>(2)</sup> |
|-------|---------------------|-------------------|---------------------|-------------------|
| $p_1$ | 0.0067              | 0.998             | 0.0250              | 0.952             |
| $p_2$ | 0.0161              | 0.994             | 0.0236              | 0.963             |
| $p_3$ | 0.0186              | 0.980             | 0.0297              | 0.939             |

(1) výsledky při koncentraci  $0.1 \text{ kg.kg}^{-1}$

(2) výsledky při koncentraci  $0.5 \text{ kg.kg}^{-1}$

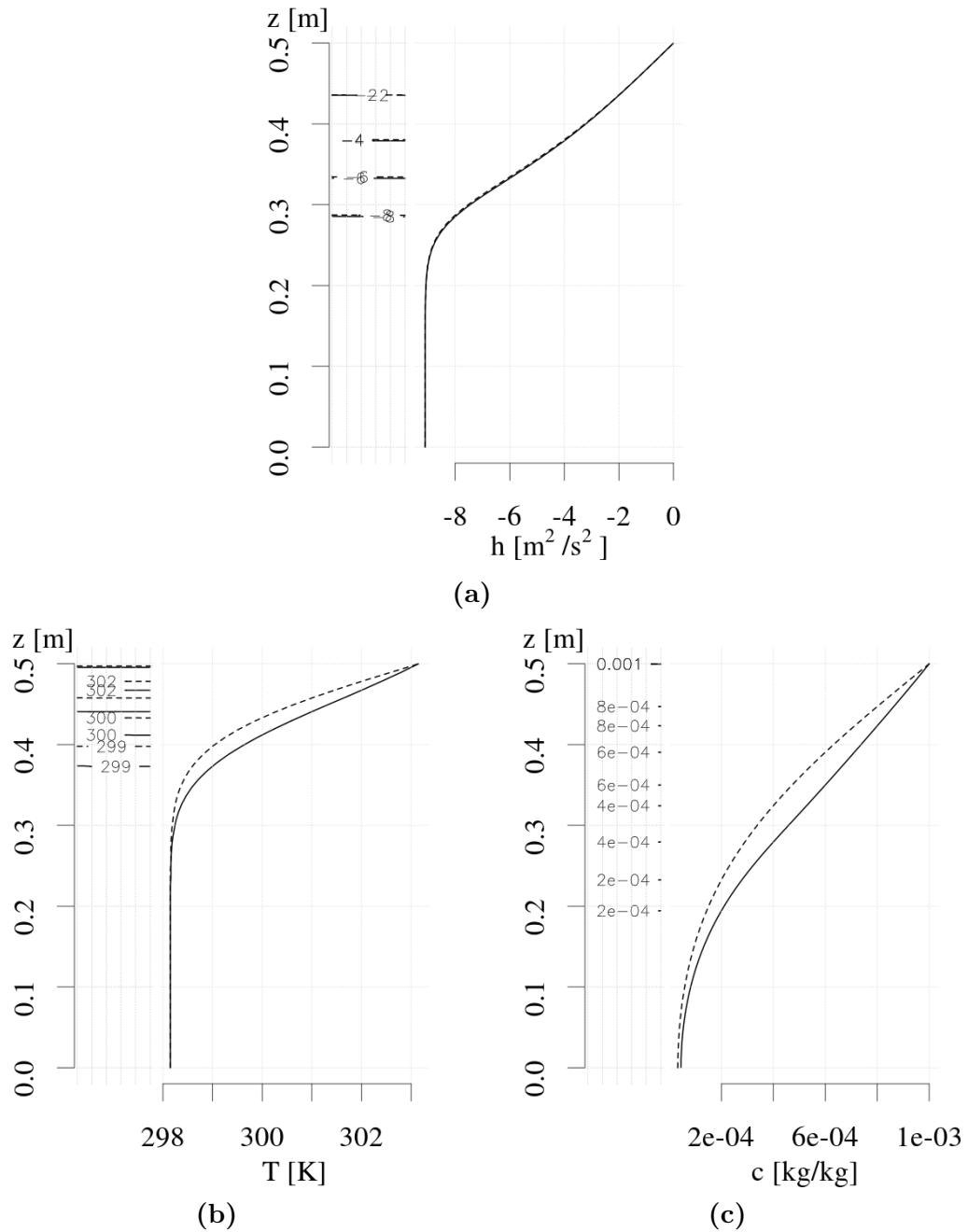
## 5.4 Kontrola sdruženého modelu

Ve třech předešlých podkapitolách jsem ukázal výsledky výpočtů jednotlivých procesů porovnané s příslušným analytickým řešením. Procesy byly posuzovány samostatně. Okrajové a počáteční podmínky jsem vždy nastavil tak, že nevznikal

žádný jiný gradient, než gradient příslušného procesu. V poslední části této práce jsem ukázal výsledky výpočtu sdruženého modelu. V tomto modelu již má na transport vlhkosti vliv i teplotní a koncentrační gradient, na transport tepla vliv gradient vlhkostní a koncentrační a na transport mísitelné látky vliv i gradient vlhkostní a teplotní. Rovněž se zde poprvé plně projeví všechny vodivosti popsané v kapitole 2.4.2

Jednotlivé sdružené vlivy jsem porovnal s referenčním řešením. Referenční řešení je opět řešení jednotlivých samostatných transportních dějů. Parametry jsem použil stejné jako v předchozích případech. K zvýraznění určitého efektu jsem varioval hodnotu nasycené hydraulické vodivosti a specifické storativity. Na ukázkou jsem provedl výpočet úzkého svislého 2D profilu o délce 0.5 m a šířce 0.01 m s diskretizačním krokem 0.01 m. K vygenerování výpočetní sítě jsem použil interní generátor již implementovaný v kódu modelu DRUtES. Na obrázcích 5.7 je ukázáno řešení, kde je u každého procesu Dirichletova okrajová podmínka na vrchním konci profilu. Na ostatních okrajích je nastavena nulová Neumanova okrajová podmínka. Nasycená hydraulická vodivost byla  $K_s = 1.4162 \cdot 10^{-4} \text{ kg.s.m}^{-3}$  a specifická storativita  $S_s = 1.2 \cdot 10^{-2} \text{ s}^2.\text{m}^{-2}$ . Přerušovaná čára ukazuje referenční výsledek, plná čára výsledek sdruženého modelu. Ukázaný výsledek je v čase 1 hodina od začátku výpočtu.

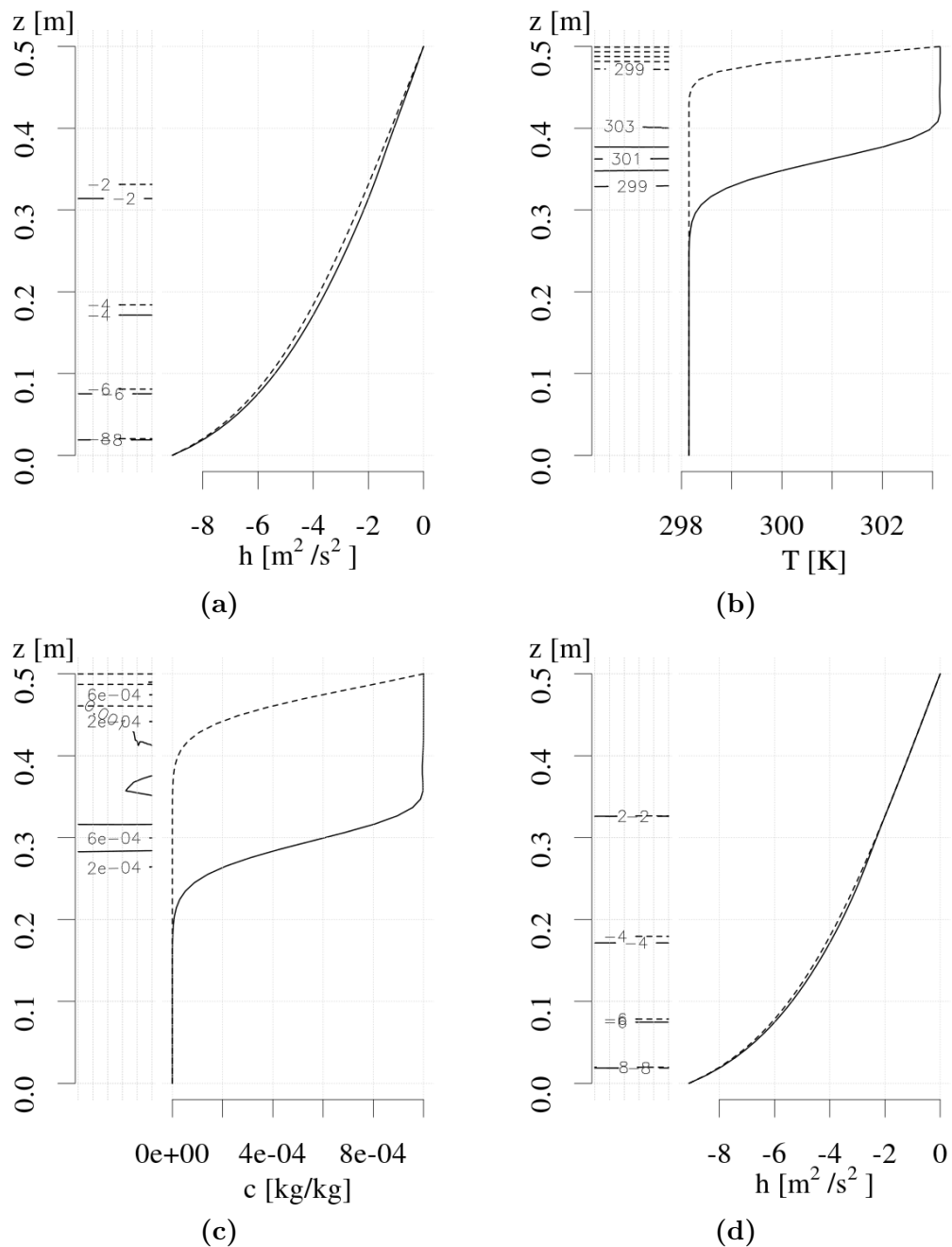
Jak je vidět na obrázku 5.7a, změny teploty a koncentrace neměly přílišný vliv na tok vlhkosti (přestože určitý vliv samozřejmě existuje a bude ukázán na následujících příkladech). Vliv vlhkostního gradientu na transport tepla a koncentrace mísitelné látky je významnější. Na obrázku 5.7c je dobře vidět opačné zakřivení koncentračního profilu mezi hloubkami 0.3 a 0.5 metrů proti referenčnímu řešení. V tomto případě se jedná o vliv zvýšení advekce neboť řídicí rovnice transportu mísitelné látky jinak sdružená není.



**Obrázek 5.7:** Ukázka vlivu vlhkostního gradientu (a) na transport tepla (b) a mísitelné látky (c); přerušovaná čára je referenční řešení, plná čára sdružené řešení

Na obrázcích 5.8 je ukázána obdobná situace. Vlhkostní profil je „zafixován“ Dirichletovou okrajovou podmínkou i na spodní straně profilu. Nasycená hydraulická vodivost byla nastavena na  $K_s = 4.45 \cdot 10^{-2} \text{ kg.s.m}^{-3}$  a specifická storativita na  $S_s = 1.2 \cdot 10^{-5} \text{ s}^2.\text{m}^{-2}$ . Přerušovaná čára opět značí referenční (nesdružené) řešení, plná pak sdružené. Na obrázcích 5.8a, 5.8b a 5.8c je ukázán stav po dvou minutách výpočtu. Na obrázku 5.8d ve čtvrté minutě. Na obrázku 5.8a je vidět určitý posun sdruženého řešení směrem ke spodní části profilu. Tento posun je

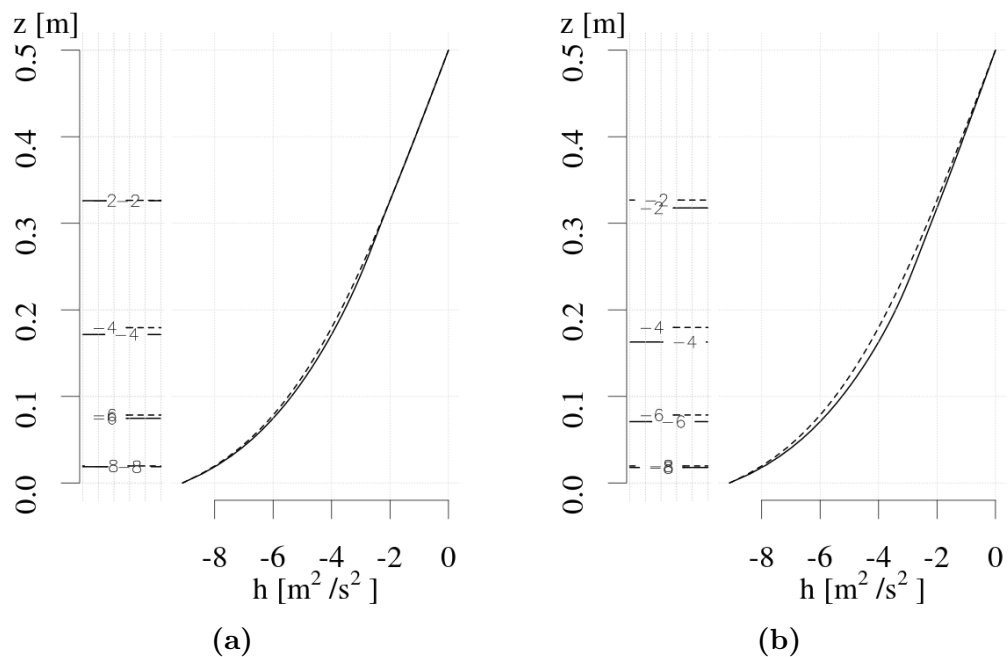
způsoben difúzním vlivem teplotního a koncentračního gradientu. Tento rozdíl začíná na obrázku 5.8a v hloubce 0.4 metru, tedy tam, kde začíná čelo transportu tepla. Tento rozdíl se pak propaguje až k dolní okrajové podmínce přes oblast s větším vlivem koncentračního gradientu zhruba pod hloubkou 0.3 metru. Obrázek 5.8d pak ilustruje, že po přechodu teplotního i koncentračního čela (která na obrázku v tomto čase ukázána nejsou) je gradientní vliv teploty a koncentrace nulový a výsledek sdruženého transportu vlhkosti se blíží referenčnímu mezi hloubkami 0.3 a 0.5 metru.



**Obrázek 5.8:** Ukázka vlivu teplotního (b) a koncentračního (c) gradientu na transport vlhkosti (a), (d); přerušovaná čára je referenční řešení, plná sdružené



Teplota a koncentrace mísitelné látky má rovněž absolutní vliv na transport vlhkosti. V modelu je implementován například pomocí tzv. *STVF* modelu, tedy za pomoci změn viskozity vody se změnou teploty a koncentrace. Na obrázku 5.9a je ukázán stejný výsledek jako na obrázku 5.8d a vedle něj, pro snadnější srovnání, výsledek po zapnutí *STVF* modelu ve stejném čase. Referenční teplota *STVF* modelu, tedy teplota zadané nasycené hydraulické vodivosti, byla nastavena na  $293.15\text{ K}$ . Teplotní profil má hodnoty teplot od  $297.15$  do  $333.15\text{ K}$ . Podle *STVF* modelu by tedy teplota nastavená jako referenční měla ve výpočtu zvýšit nasycenou hydraulickou vodivost, protože je nižší než teploty v profilu a hydraulická vodivost s teplotou roste. To je na obrázku vidět nad hloubkou  $0.3$  metru. Výsledek na obrázku 5.9a, kde není absolutní vliv teploty zahrnut, se po průchodu teplotní a koncentrační fronty blíží zpět referenčnímu řešení, zatímco vlhkost se zahrnutým *STVF* modelem ovlivňuje vlhkostní profil i nad teplotní a koncentrační frontou, nad hloubkou  $0.3\text{ m}$  na obrázku 5.9b.



**Obrázek 5.9:** Ukázka absolutního vlivu teploty na transport vlhkosti; přerušovaná čára je referenční řešení, plná sdružené

# Kapitola 6

## Diskuse

Prezentovaný model sdruženého transportu vlhkosti, teploty a mísitelné látky je reprezentací idealizovaného prostředí. Je v něm zanedbán vliv hystereze. Prezentované výsledky absolutního i gradientního vlivu teploty sice ukázaly chování odpovídající chování popsané v literatuře (de Vries, 1958), tento vliv je ale relativně malý a je možné, že hystereze by měla na proudění významnější vliv.

Porézní prostředí je rovněž uvažováno jako inertní vůči dané mísitelné směsi, což v dlouhodobějším měřítku nemusí platit (McNeal & Coleman, 1966; Suarez et al., 1984). Model měl v době odevzdání této práce implementované empiricky odvozené vztahy určené pouze k výpočtu  $NaCl$  jako mísitelné látky. Jedná se o vztah povrchového napětí, dynamické viskozity, aktivity roztoku  $NaCl$ , hustoty roztoku a tepelné vodivosti daného roztoku. Všechny tyto vztahy je tedy třeba v případě potřeby výpočtu transportu jiné látky v kódu doplnit.

Na výsledcích výpočtů prezentovaných v předchozí kapitole jsem ukázal, že rovnice jednotlivých procesů jsou pravděpodobně implementovány správně. Richardsovu rovnici jsem porovnal s Philipsovým semi-analytickým řešením podobně jako například Haverkamp et al. (1977). Richardsova rovnice se začala za Philipsovým řešením v čase opožďovat. Jak ukázal například Mollerup (2007), Philipsovo řešení se takto chová, to znamená, že se v určitém čase vůči skutečnému řešení zrychlí. Toto však nastává později, než byl prezentovaný časový interval. Rozdíl těchto řešení bych tedy připsal rozdílné formě stávající řešené rovnice a rovnice řešené Philipsem. Srovnání transportu teploty s analytickým řešením

advektivně disperzní rovnice ukázalo na správnost daného numerického řešení. Rovnice transportu mísitelné látky rovněž ukázala vyhovující srovnání s analytickým řešením.

Některé vztahy parametrů mají určité limity platnosti. Vztah hustoty roztoku je platný pouze do hodnoty koncentrace  $0.5 \text{ kg.kg}^{-1}$ . Tato limitace by však neměla omezit případné použití modelu, neboť v přírodních podmínkách se takto vysoká koncentrace spíše nevyskytne.

Sdružený model byl ukázán a vyhodnocen pouze kvalitativně, i když analytická řešení jsou rovněž pro určité případy k dispozici, například Chang & Weng (2000). Snažil jsem se demonstrovat vliv sdružení, tedy vzájemný gradientní vliv i absolutní vliv teploty na tok vlhkosti skrze změny viskozity. Tímto způsobem jsem ukázal fungování sdruženého fenoménu a vyloučil pouze závažnější možnou chybu v implementaci kódu modelu.

V průběhu mnoha běhů modelu, které jsem zde neprezentoval, se ukázalo, že sdružený model může mít problém s konvergencí řešení. Řešená soustava je naplněna hodnotami, které se liší o mnoho řádů. Zatímco hodnota specifické storativity nabývá v Richardsově rovnici spíše menších hodnot blízkých jedné, objemová tepelná kapacita porézního prostředí nabývá řádově hodnot i nad  $10^6$ . Rovněž všechny vodivostní koeficienty jsou typicky malá čísla. Pro určité časové a prostorové diskretizace se mohou hodnoty prvků matice lišit i o více než 10 řádů. Najít pak vhodnou diskretizaci, která nebude vést k nepřiměřeně dlouhému výpočtu, může být obtížné zejména v 1D řešení.

# Kapitola 7

## Závěr

Model sdruženého transportu má mnoho využití od aplikací v zemědělství, výzkumu hydrologického sucha přes aplikace ve stavebnictví, až po výzkum v oblasti změn klimatu. V rámci prezentované práce jsem vytvořil model, který by se v těchto oblastech mohl využít. Před praktickým použitím bych ale doporučil otestovat model na reálných datech s využitím i dalších typů, i časově proměnných, okrajových podmínek.

# Literatura

**Baver et al., (1972).** Baver L. D., Gardner W. H., Gardner W. R., Soil Physics, *New York*, 1972.

**Bear (2012).** Bear J., Hydraulics of groundwater, 2012.

**Bohn et al., (1985).** Bohn H. L., McNeal B. L., O'Neal G. A., Soil chemistry, *Soil Science Society of America*, 1985.

**Cass et al., (1984).** Cass A., Campbell G. S., Jones T. L., Enhancement of thermal water vapor diffusion in soil, *Soil Science Society of America Journal* 48:25–32, 1984.

**Chang & Weng (2000).** Chang Win-Jin, Weng Cheng-I, An analytical solution to coupled heat and moisture diffusion transfer in porous materials, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 43:3621 – 3632, 2000.

**Constantz (1982).** Constantz J., Temperature dependence of unsaturated hydraulic conductivity of two soils, *Soil Science Society of America Journal* 46(3):466–470, 1982.

**Císlerová & Vogel (1998).** Císlerová M., Vogel T., Transportní procesy, *Skriptum ČVUT*, 1998.

**Darcy (1856).** Darcy H., Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon ("The Public Fountains of the Town of Dijon"), *Dalmont, Paris*, 1856.

**de Costa et al., (1986).** de Costa A. S., Baptista A. M., Gray W. G., Brebbia C. A., Pinder G. F., Finite Elements in Water Resources, *Proceedings of the 6th International Conference, Lisboa, Portugal, June 1986*, 1986.

**de Silans et al., (1989).** de Silans A. P., Bruckler L., Thony J. L., Vauclin M., Numerical Modeling of Coupled Heat and Water Flows During Drying in a Stratified Bare Soil - Comparison with Field Observation, *Journal of Hydrology* 105:109 – 138, 1989.

**de Vries (1958).** de Vries D. A., Simultaneous Transfer of Heat and Moisture in Porous Media, *Transactions, American Geophysical Union* 39:909–915, 1958.

**Giakoumakis & Tsakiris (1991).** Giakoumakis S. G., Tsakiris G. P., Eliminating the effect of temperature from unsaturated soil hydraulic functions, *Journal of Hydrology* 129:109 – 125, 1991.

- Haverkamp et al., (1977)**. Haverkamp R., Touma M., Vauclin J., Wierenga P. J., Vachaud G., A Comparison of Numerical Simulation Models For One-Dimensional Infiltration, *Soil Science Society of America Journal* 41:285 – 294, 1977.
- Huston & Cass (1987)**. Huston J. L., Cass A., A retentivity function for use in soil-water simulation models, *Journal of Soil Science* 38:105 – 113, 1987.
- Jeřábek (2012)**. Jeřábek Jakub, Úvod do matematického modelování Darcyovského proudění v proměnlivě nasyceném porézním prostředí, *Bakalářská práce*, 2012.
- Kemper & Evans (1963)**. Kemper W. D., Evans N. A., Movement of water as effected by free energy and pressure gradients III. Restriction of solutes by membranes, *Soil Science Society of America Journal* 27:485–490, 1963.
- Kirkham & Powers (1972)**. Kirkham D., Powers W. L., Advanced soil physics pp. 286–346, 1972.
- Kodešová (2005)**. Kodešová R., Modelování v pedologii, *Skriptum ČZU*, 2005.
- Kuráž (2011)**. Kuráž M., Numerical solution of the flow and transport equations in porous media with the dual porosity conceptual approach, *Disertační práce*, 2011.
- Kutílek (1975)**. Kutílek M., Aplikovaná Hydropedologie, 1975.
- Kutílek et al., (2004)**. Kutílek M., Kuráž V., Císlerová M., Hydropedologie 10, *Skriptum ČVUT*, 2004.
- Low (1955)**. Low P. F, Effect of osmotic pressure on diffusion rate of water, *Soil Science* 80:95–100, 1955.
- McNeal & Coleman (1966)**. McNeal B. L., Coleman N. T., Effect of solution composition on soil hydraulic conductivity, *Soil Science Society of America Journal* 30:308–312, 1966.
- Miller & Miller (1956)**. Miller E. E., Miller R. D., Physical Theory for Capillary Flow Phenomena, *Journal of Applied Physics* 27:324 – 332, 1956.
- Mollerup (2007)**. Mollerup M., Philip's infiltration equation for variable-head ponded infiltration, *Journal of Hydrology* 347:173 – 176, 2007.
- Mualem (1976)**. Mualem Yechezkel, A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media, *Water resources research* 12:513–522, 1976.
- Nassar & Horton (1989a)**. Nassar I. N., Horton R., Water Transport in Unsaturated Nonisothermal Salty Soil: I. Eperimental, *Soil Sci. Soc. Am. J.* 53:1323 – 1329, 1989a.
- Nassar & Horton (1989b)**. Nassar I. N., Horton R., Water Transport in Unsaturated Nonisothermal Salty Soil: II. Theoretical Development, *Soil Sci. Soc. Am. J.* 53:1330 – 1337, 1989b.

- Nimmo & Miller (1986)**. Nimmo J. R., Miller E. E., The Temperature Dependence of Isothermal Moisture vs. Potential Characteristics of Soils, *Soil Sci. Soc. Am. J.* 50:1105 – 1113, 1986.
- Nonorio et al., (1996a)**. Nonorio K., McInnes K. J., Heilman J. L., Two-dimensional model for water, heat, and solute transport in furrow-irrigated soil: I. Theory, *Soil Science Society of America Journal* 60:1001–1009, 1996a.
- Nonorio et al., (1996b)**. Nonorio K., McInnes K. J., Heilman J. L., Two-Dimensional Model for Water, Heat and Solute Transport in Furrow-Irrigated Soil: II. Field Evaluation, *Soil Sci. Soc. Am J.* 60:1010 – 1021, 1996b.
- Philip (1955)**. Philip JRj, Numerical solution of equations of the diffusion type with diffusivity concentration-dependent, *Trans. Faraday Soc.* 51:885–892, 1955.
- Philip (1957a)**. Philip JR, Numerical Solution of Equations of the Diffusion Type with Diffusivity Concentration? Dependent. II., *Australian Journal of Physics* 10:29–42, 1957a.
- Philip (1957b)**. Philip JR, The theory of infiltration: 1. The infiltration equation and its solution., *Soil science* 83:345–358, 1957b.
- Philip & de Vries (1957)**. Philip J. R., de Vries D. A., Moisture movement in porous materials under temperature gradients, *Transactions, American Geophysical Union* 38:222 –232, 1957.
- R Core Team (2013)**. *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria.
- Rawls et al., (1982)**. Rawls W. J., Brakensiek D. L., Saxton K. E., Estimation of soil water properties, *Trans. Asae* 25:1316–1320, 1982.
- Richards (1931)**. Richards L. A., Capillary conduction of liquid through porous mediums, *Physics* 1:318 – 333, 1931.
- Robinson & Stokes (2002)**. Robinson R. A., Stokes R. H., Electrolyte solutions, *Courier Corporation*, 2002.
- Rypl (2002)**. Rypl D., T3D mesh generator: <http://mech.fsv.cvut.cz/~dr/t3d.html>, 2002.
- Saxton et al., (1986)**. Saxton K. E., Rawls W. J., Romberger J. S., Papendick R. I., Estimating generalized soil-water characteristics from texture, *Soil Science Society of America Journal* 50:1031–1036, 1986.
- Strang & George (1973)**. Strang G., George F. J., An analysis of the finite element method 212, 1973.
- Suarez et al., (1984)**. Suarez D. L., Rhoades J. D., Lavado R., Grieve C. M., Effect of pH on saturated hydraulic conductivity and soil dispersion, *Soil Science Society of America Journal* 48:50–55, 1984.

- van Genuchten (1980).** van Genuchten M. Th., A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils, *Soil Sci. Soc. Am J.* 44:892 – 898, 1980.
- van Genuchten & Nielsen (1985).** van Genuchten M. Th., Nielsen D. R., On describing and predicting the hydraulic properties of unsaturated soils, *Ann. Geophys* 3(5):615–628, 1985.
- Warrick (2001).** Warrick A. W., Soil physics companion, 2001.
- Wösten & van Genuchten (1988).** Wösten J. H. M., van Genuchten M. Th., Using texture and other soil properties to predict the unsaturated soil hydraulic functions, *Soil Science Society of America Journal* 52:1762–1770, 1988.
- Zienkiewicz et al., (2000).** Zienkiewicz O. C., Taylor R. L., Nithiarasus P., The finite element method: Solid mechanics 2, 2000.



# Příloha A

## Appendix

### A.1 Slabá forma Richarsovy rovnice

Forma Richardsovy rovnice (2.43) s rozepsanými toky (2.14) a (2.15) je

$$\begin{aligned} \left( S_s \frac{\theta}{n} + \frac{d\theta}{d\Psi} \right) \frac{\partial \Psi}{\partial t} = & \\ = \frac{\partial}{\partial z} \left( \left( K_{\Psi,l} \frac{1}{\rho_l} + K_{\Psi,v} \frac{1}{\rho_w} \right) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{\Psi,l} \frac{1}{\rho_l} \right) + & \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left( \left( K_{T,l} \frac{1}{\rho_l} + K_{T,v} \frac{1}{\rho_w} \right) \frac{\partial T}{\partial z} \right) + & \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left( \left( K_{c,l} \frac{1}{\rho_l} + K_{c,v} \frac{1}{\rho_w} \right) \frac{\partial c}{\partial z} \right). & \quad (\text{A.1}) \end{aligned}$$

Nyní vynásobíme rovnici libovolnou testovací funkcí  $w$  a integrujeme. Na časovou derivaci je použito implicitní Eulerovo schéma. Před integrací vypadá rovnice následovně (A.1).

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left( S_s \frac{\theta}{n} + \frac{d\theta}{d\Psi} \right) \frac{\Psi - \Psi_p}{\Delta t} w d\Omega = & \\ = \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial z} \left( \left( K_{\Psi,l} \frac{1}{\rho_l} + K_{\Psi,v} \frac{1}{\rho_w} \right) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) w d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{\Psi,l} \frac{1}{\rho_l} \right) w d\Omega & \\ + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial z} \left( \left( K_{T,l} \frac{1}{\rho_l} + K_{T,v} \frac{1}{\rho_w} \right) \frac{\partial T}{\partial z} \right) w d\Omega + & \\ + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial z} \left( \left( K_{c,l} \frac{1}{\rho_l} + K_{c,v} \frac{1}{\rho_w} \right) \frac{\partial c}{\partial z} \right) w d\Omega & \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

Po aplikaci metody *per-partes* na dané členy získáme slabou formu rovnice (A.1).

Integrál s okrajovou podmínkou, jako je ukázán v rovnici 3.6, je zde pro přehlednost vynechán.

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left( S_s \frac{\theta}{n} + \frac{d\theta}{d\Psi} \right) \frac{\Psi - \Psi_p}{\Delta t} w d\Omega = \\
& = - \int_{\Omega} \left( K_{\Psi,l} \frac{1}{\rho_l} + K_{\Psi,v} \frac{1}{\rho_w} \right) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial z} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{\Psi,l} \frac{1}{\rho_l} \right) w d\Omega - \\
& \quad - \int_{\Omega} \left( K_{T,l} \frac{1}{\rho_l} + K_{T,v} \frac{1}{\rho_w} \right) \frac{\partial T}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial z} d\Omega - \\
& \quad - \int_{\Omega} \left( K_{c,l} \frac{1}{\rho_l} + K_{c,v} \frac{1}{\rho_w} \right) \frac{\partial c}{\partial z} \frac{\partial w}{\partial z} d\Omega. \quad (\text{A.3})
\end{aligned}$$

Nyní tedy vytvoříme soustavu algebraických rovnic pro každý početní uzel. Řešení  $\Psi$ ,  $T$  a  $c$  aproximujeme lineární kombinací diskretizovaného řešení  $\Psi_d$ ,  $T_d$ ,  $c_d$  a bázové funkce  $\phi$ . Výsledná řešení tedy budou vypadat

$$\begin{aligned}
\Psi &\approx \Psi_d = \Psi_{d1}\phi_1 + \Psi_{d2}\phi_2 + \dots + \Psi_{dn}\phi_n \\
T &\approx T_d = T_{d1}\phi_1 + T_{d2}\phi_2 + \dots + T_{dn}\phi_n \\
c &\approx c_d = c_{d1}\phi_1 + c_{d2}\phi_2 + \dots + c_{dn}\phi_n
\end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Dále pak dosadíme lineární kombinaci testovacích funkcí. Výsledná  $b$ -tá rovnice bude vypadat

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left( S_s \frac{\theta}{n} + \frac{d\theta}{d\Psi} \right) \frac{\sum_a (\Psi_{da}\phi_d) - \Psi_p}{\Delta t} V_b d\Omega = \\
& = - \int_{\Omega} \left( \left( K_{\Psi,l} \frac{1}{\rho_l} + K_{\Psi,v} \frac{1}{\rho_w} \right) \sum_a \Psi_{da} \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \right) \frac{\partial V_b}{\partial z} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{\Psi,l} \frac{1}{\rho_l} \right) V_b d\Omega - \\
& \quad - \int_{\Omega} \left( \left( K_{T,l} \frac{1}{\rho_l} + K_{T,v} \frac{1}{\rho_w} \right) \sum_a T_{da} \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \right) \frac{\partial V_b}{\partial z} d\Omega - \\
& \quad - \int_{\Omega} \left( \left( K_{c,l} \frac{1}{\rho_l} + K_{c,v} \frac{1}{\rho_w} \right) \sum_a c_{da} \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \right) \frac{\partial V_b}{\partial z} d\Omega. \quad (\text{A.5})
\end{aligned}$$

Dle Galerkinovy metody platí, pro všechny bázové a testovací funkci, že  $\phi_a = V_b$  pokud  $a = b$ . V rovnici jsou rovněž Neumannovi okrajové podmínky. Okrajové podmínky jsou definovány ve zvláštní podkapitole.

## A.2 Slabá forma rovnice proudění tepla

Nejdříve zobrazená rozepsaná rovnice (2.44). Tok v advekčním členu rovnice rozepsán není, neb se není, jako nelineární člen, v tento moment hledán

$$C_{ps} \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + L_w \left( \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{\Psi,v} \frac{\partial \Psi}{\partial z} + K_{C,v} \frac{\partial c}{\partial z} \right) \right) - C_{pl} \mathbf{q}_l \frac{\partial T}{\partial z}. \quad (\text{A.6})$$

Nyní opět vynásobíme rovnic testovací funkcí  $w$  a integrujeme přes oblast  $\Omega$ , časovou derivaci nahradíme zpětnou diferencí.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} C_{ps} \frac{T - T_p}{\Delta t} w d\Omega &= \int_{\Omega} \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} w d\Omega + \int_{\Omega} L_w \left( \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{\Psi,v} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) \right) w d\Omega + \\ &+ \int_{\Omega} L_w \left( \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{C,v} \frac{\partial c}{\partial z} \right) \right) w d\Omega - \int_{\Omega} C_{pl} \mathbf{q}_l \frac{\partial T}{\partial z} w d\Omega. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

První, druhý a třetí člen na pravé straně integrujeme pomocí metody *per-partes* a rovnou aproximujeme řešení lineární kombinací ve smyslu předpisů (A.4). Tím získáme předpis pro odvození  $b$ -té rovnice.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} C_{ps} \frac{\sum_a (T_{da} \phi_a) - T_p}{\Delta t} V_b d\Omega &= - \int_{\Omega} \lambda \sum_a \left( T_{da} \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \right) \frac{\partial V_b}{\partial z} d\Omega - \\ &- \int_{\Omega} L_w K_{\Psi,v} \left( \sum_a \Psi_{da} \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \right) \frac{\partial V_b}{\partial z} d\Omega - \int_{\Omega} L_w K_{c,v} \left( \sum_a c_{da} \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \right) \frac{\partial V_b}{\partial z} d\Omega - \\ &- \int_{\Omega} C_{pl} \mathbf{q}_l \sum_a \left( T_{da} \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \right) V_b d\Omega \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

## A.3 Slabá forma rovnice transportu mísitelné látky

Rovnice transportu kontaminantu (2.45), tedy advekčně disperzní rovnice jest (nelineární advekční člen zůstal opět nerozepsán)

$$\theta \rho_l \frac{\partial c}{\partial t} = \theta \rho_l D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \mathbf{q}_l \frac{\partial c}{\partial z} \quad (\text{A.9})$$

Vynásobíme libovolnou testovací funkcí  $w$ , integrujeme před oblast  $\Omega$  (disperzní člen pomocí metody *per-partes*) a vyjádříme časovou derivaci zpětnou diferencí.

Přímo aproximujeme řešení lineární kombinací (A.4).

$$\int_{\Omega} \theta \rho_l \frac{\sum_a (c_{da} \phi_a) - c_p}{\Delta t} V_b d\Omega = - \int_{\Omega} \theta \rho_l D \sum_a \left( c_{da} \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \right) \frac{\partial V_b}{\partial z} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{q}_l \sum_a \left( c_{da} \frac{\partial \phi_a}{\partial z} \right) V_b d\Omega \quad (\text{A.10})$$

## A.4 Tabulkové hodnoty aktivity vybraných roztoků

Tabulkové hodnoty aktivit pro *NaCl* převzány z (Robinson & Stokes, 2002).

**Tabulka A.1:** Aktivita *NaCl*

| <i>mol/kg</i> | $\bar{a}$ | <i>mol/kg</i> | $\bar{a}$ | <i>mol/kg</i> | $\bar{a}$ | <i>mol/kg</i> | $\bar{a}$ |
|---------------|-----------|---------------|-----------|---------------|-----------|---------------|-----------|
| 0.1           | 0.996646  | 1.2           | 0.9601    | 3.2           | 0.8851    | 5.2           | 0.7976    |
| 0.2           | 0.993360  | 1.4           | 0.9532    | 3.4           | 0.8769    | 5.4           | 0.7883    |
| 0.3           | 0.99009   | 1.6           | 0.9461    | 3.6           | 0.8686    | 5.6           | 0.7788    |
| 0.4           | 0.98682   | 1.8           | 0.9389    | 3.8           | 0.8600    | 5.8           | 0.7693    |
| 0.5           | 0.98355   | 2             | 0.9316    | 4             | 0.8515    | 6             | 0.7598    |
| 0.6           | 0.98025   | 2.2           | 0.9242    | 4.2           | 0.8428    | -             | -         |
| 0.7           | 0.97692   | 2.4           | 0.9166    | 4.4           | 0.8339    | -             | -         |
| 0.8           | 0.97359   | 2.6           | 0.9089    | 4.6           | 0.8250    | -             | -         |
| 0.9           | 0.97023   | 2.8           | 0.9011    | 4.8           | 0.8160    | -             | -         |
| 1             | 0.96686   | 3             | 0.8932    | 5             | 0.8068    | -             | -         |

## A.5 Funkční předpisy vybraných parametrů

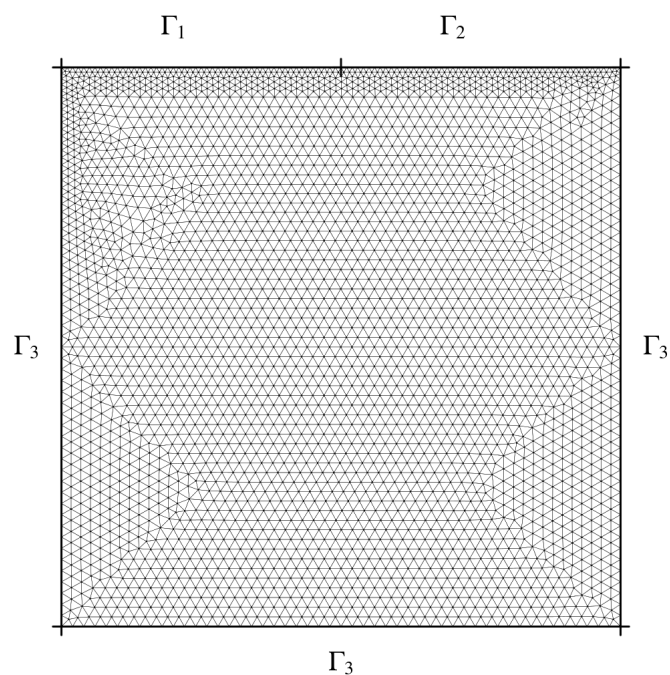
Rovnice pro odhad difuzního koeficientu roztoku *NaCl* (*T* ve °C)

$$D_0 = 7.26 \cdot 10^{-10} + 2.63 \cdot 10^{-11}T + 2.18 \cdot 10^{-12}T^2 \quad (\text{A.11})$$

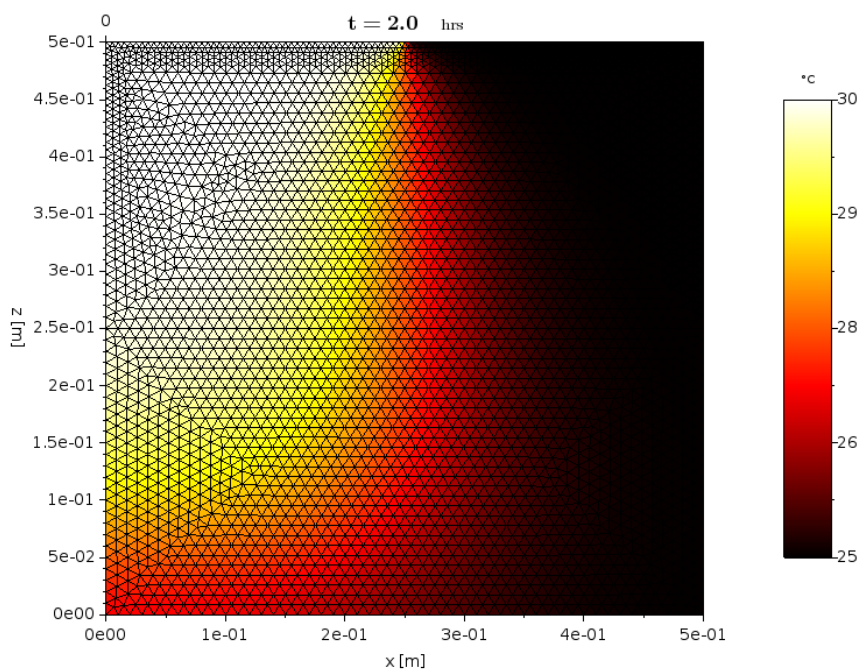
Rovnice pro odhad hustoty saturovaných pádních par

$$\rho_s = \frac{10^{-3}(\exp(31.3716 - 6014.79/T - 7.925 \cdot 10^{-3}T))}{T} \quad (\text{A.12})$$

## A.6 Ukázka výpočetní sítě a řešení teploty



Obrázek A.1: Výpočetní síť



Obrázek A.2: Ukázka řešení rovnice transportu tepla na výpočetní síti z obrázku A.1