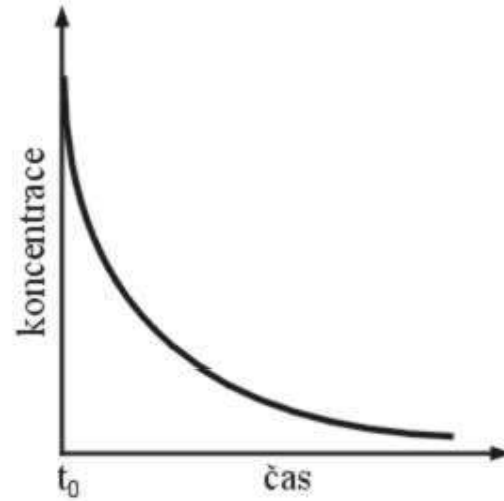
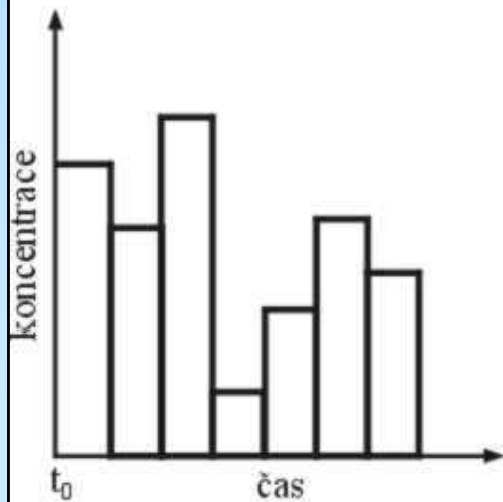
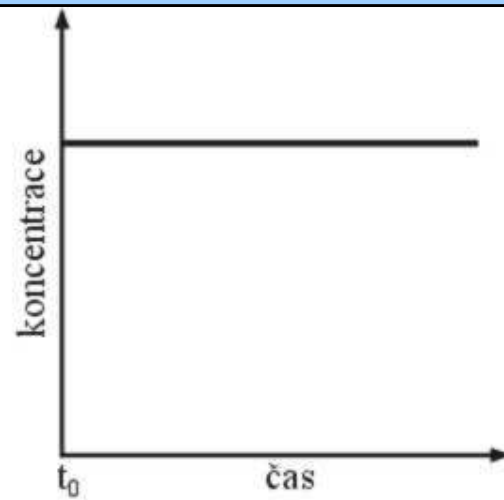
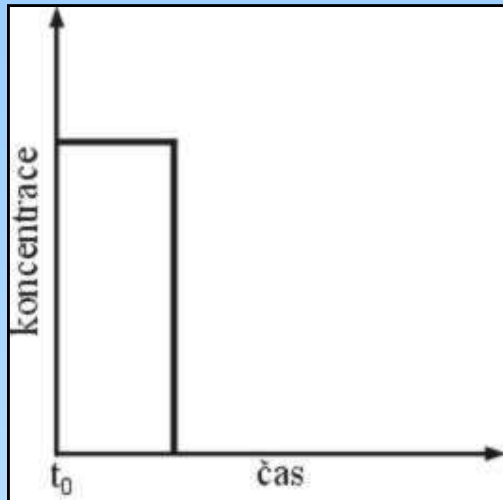


A scenic view of a forest stream with a waterfall, surrounded by trees with autumn foliage. The water is clear and flows over rocks, creating small cascades. The forest is dense with tall, thin trees, and the ground is covered in fallen leaves and moss.

POCHRANA PODZEMNÍCH VOD

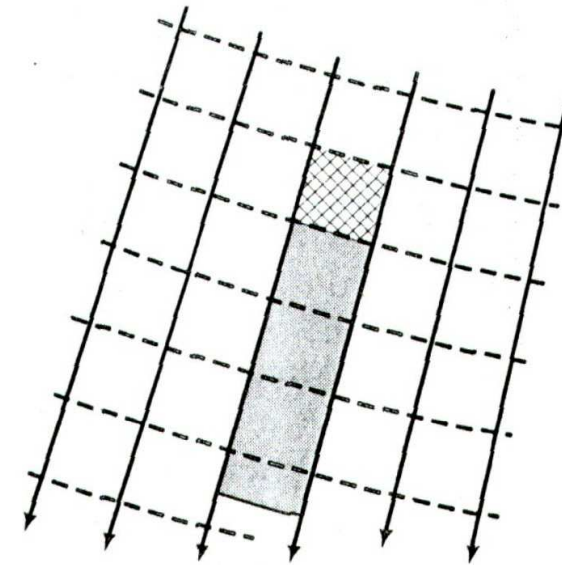
III.



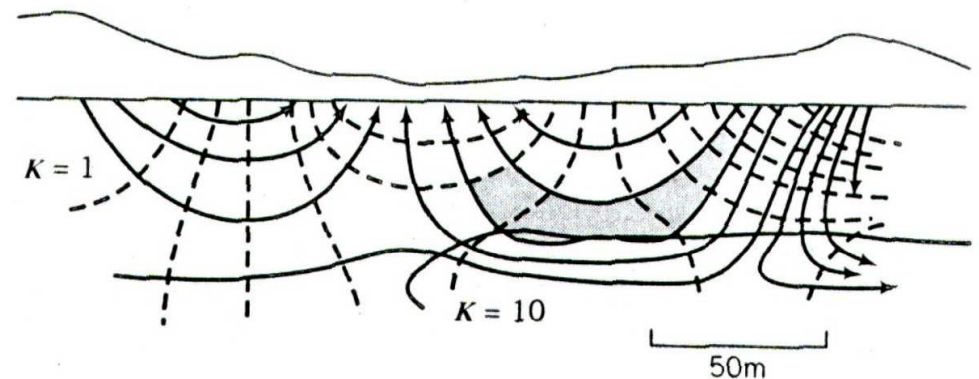
MIGRACE LÁTEK HORNINOVÝM PROSTŘEDÍM

SATUROVANÁ ZÓNA

- dominantní vliv advektivního pohybu souhlasně se směrem pohybu částic proudící kapaliny
- pohyb ve směru poklesu hydrostatického tlaku (základy hydrauliky)
- samotná advekce – popis Darcyho zákonem a v prostoru v proudové síti
- ovlivněno geologickými faktory, čerpáním, zvlňením terénu, apod. (spíše „makrovlivy“)
- nejvýznamnější proces z hlediska migrace látek rozpuštěných v podzemní vodě

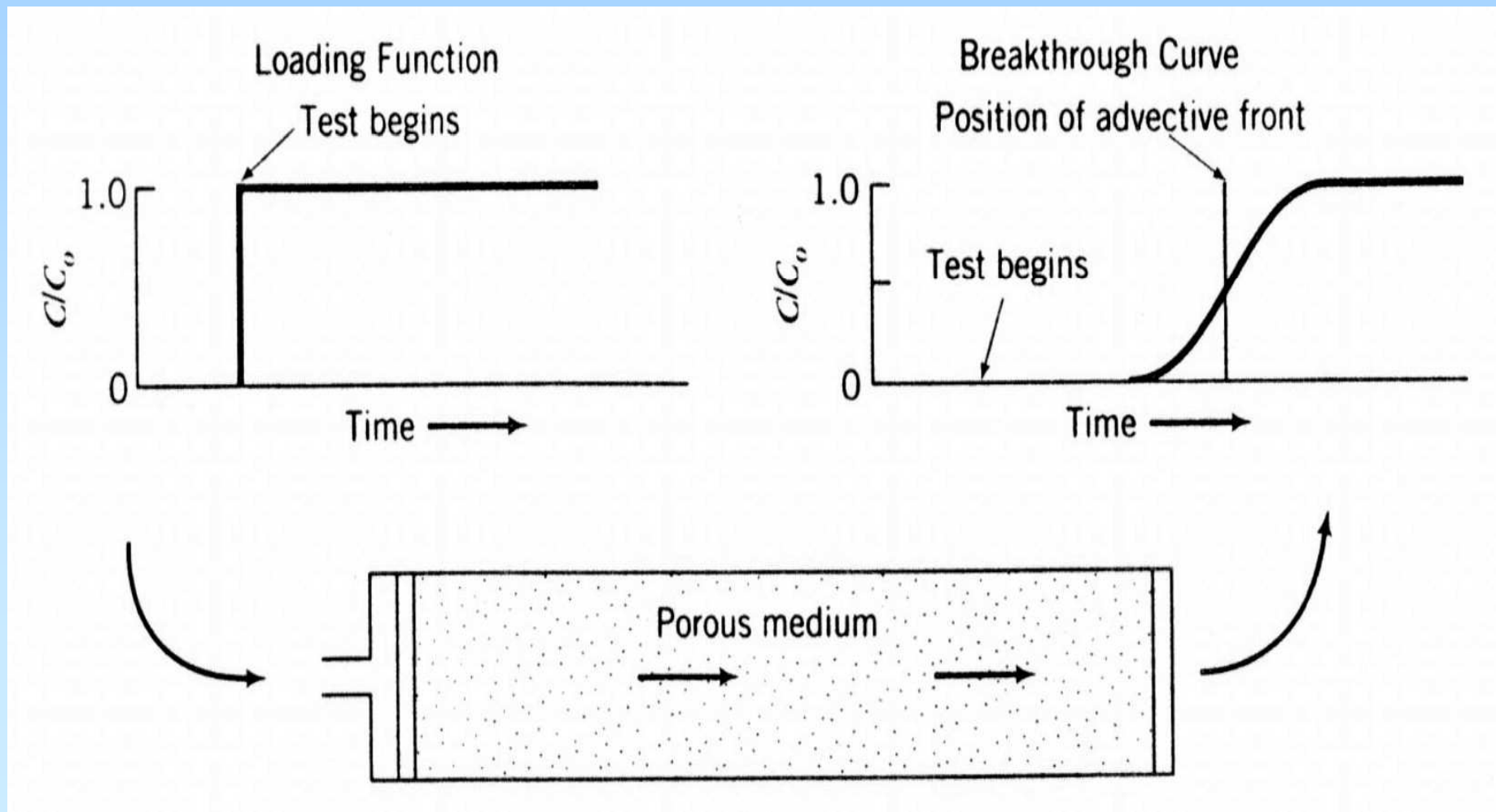


(a)

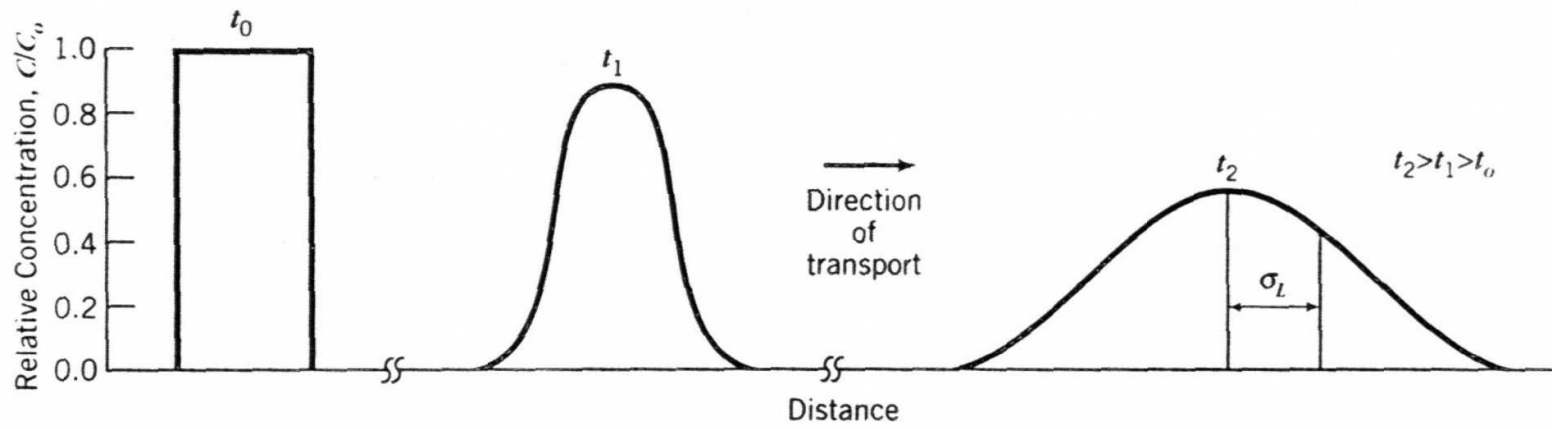


(b)

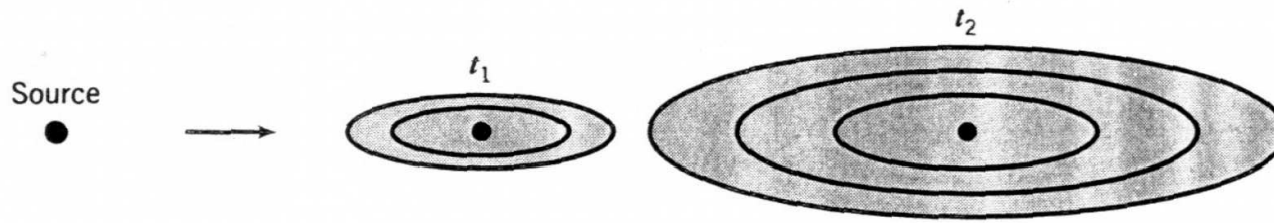
- další vlivy při migraci rozpuštěných látek v podzemní vodě – disperze + difúze, sorpce
- disperze (rozptyl) + difúze
- v české terminologii odlišné od anglické, česká mechanizmy striktně odlišuje, anglické řadí difúzi do souboru jevů tzv. hydrodynamické disperze



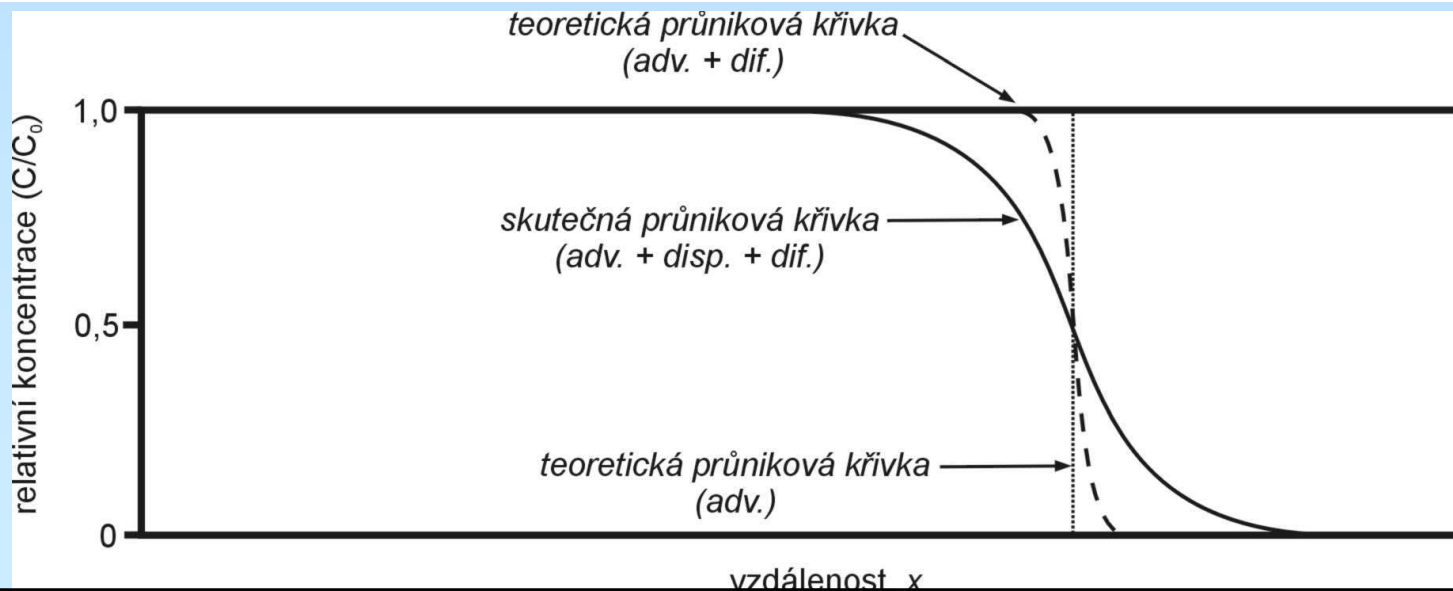
Pohyb v horninovém prostředí – působení ve všech směrech (3-D, x - y - z)

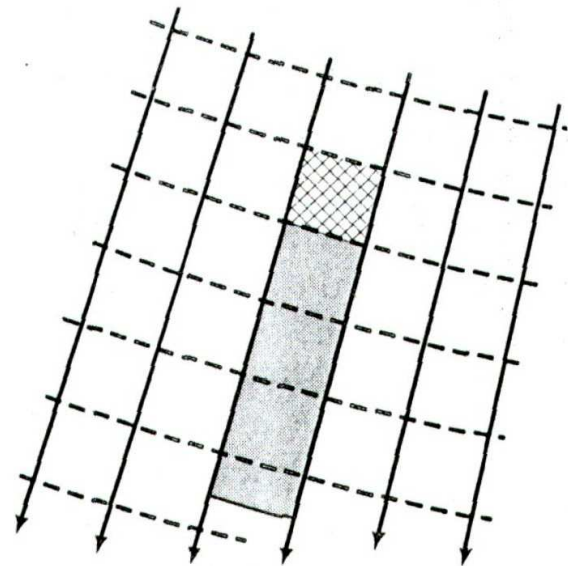


(a)



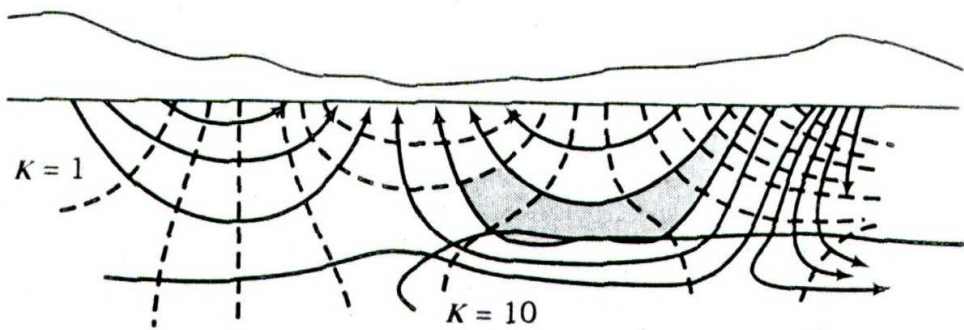
(b)



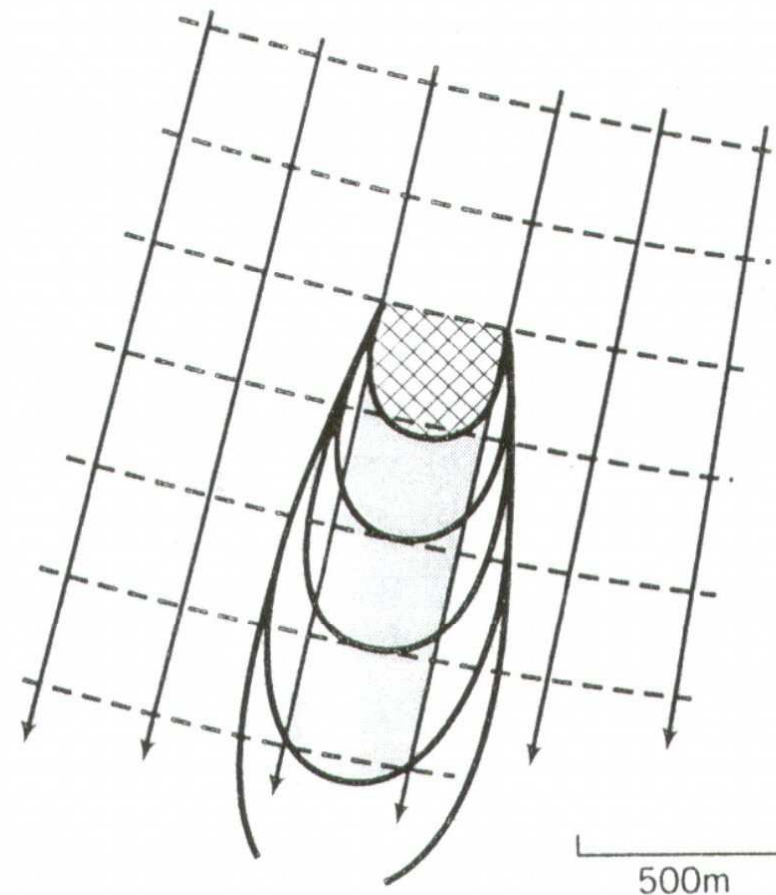


- Equipotential line
- Flow line
- ▨ Source of mass
- Advective spread of mass

(a)



(b)



- Equipotential line
- Flow line
- Concentration

DIFÚZE

- pohyb rozpuštěných látek ve formě molekul nebo atomů ve směru koncentračního gradientu
- všesměrný pohyb
- dochází k němu i ve fluidech která se nepohybují
- dochází k němu tak dlouho, dokud existuje koncentrační gradient
- z hlediska času (dlouhodobě) i v opačných směrech
 - např. rozpuštěné látky v matrix puklinově porózních hornin, méně propustných nehomogenitách

1. Fickův zákon

pro vodné prostředí obecně a v 1-D – pouze funkcí vlastnosti látky (za daných P a T podmínek)

$$F = -D_d \cdot (dC / dx)$$

D_d ... L^2/t

difuzivní koeficient

F ... mol/L^2t

změna objemu látky na jednotkovou plochu

C ... mol

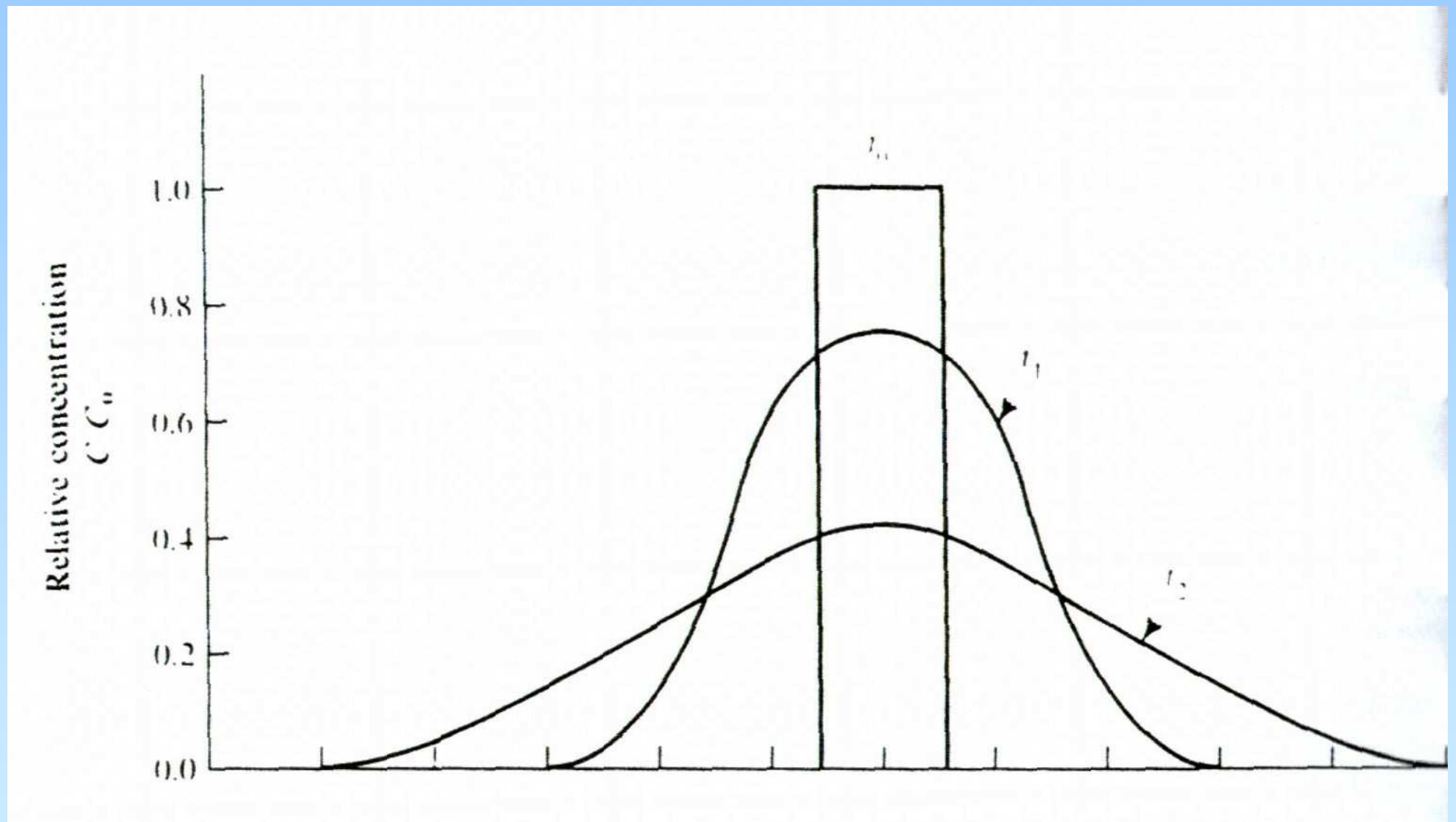
koncentrace v roztoku (konstantní)

2. Fickův zákon

pro vodné prostředí obecně a v 1-D

$$\partial C / \partial t = -D_d \cdot \partial^2 C / \partial x^2$$

DIFÚZE



- porózní prostředí – difúze je omezena pouze na póry mezi zrny
- nutné uvažovat i vlastnosti prostředí

tortuozita

- vyjadřuje klikatost průtočných kanálků při difúzním pohybu
- nejčastější definice – poměr mezi skutečnou a teoreticky nejkratší trajektorií částic

$$\tau = L_e / L$$

- číslo je vždy > 1 v porózním prostředí (teoreticky je $= 1$ v kapilárách)
- definice Beara (1972) – opačná

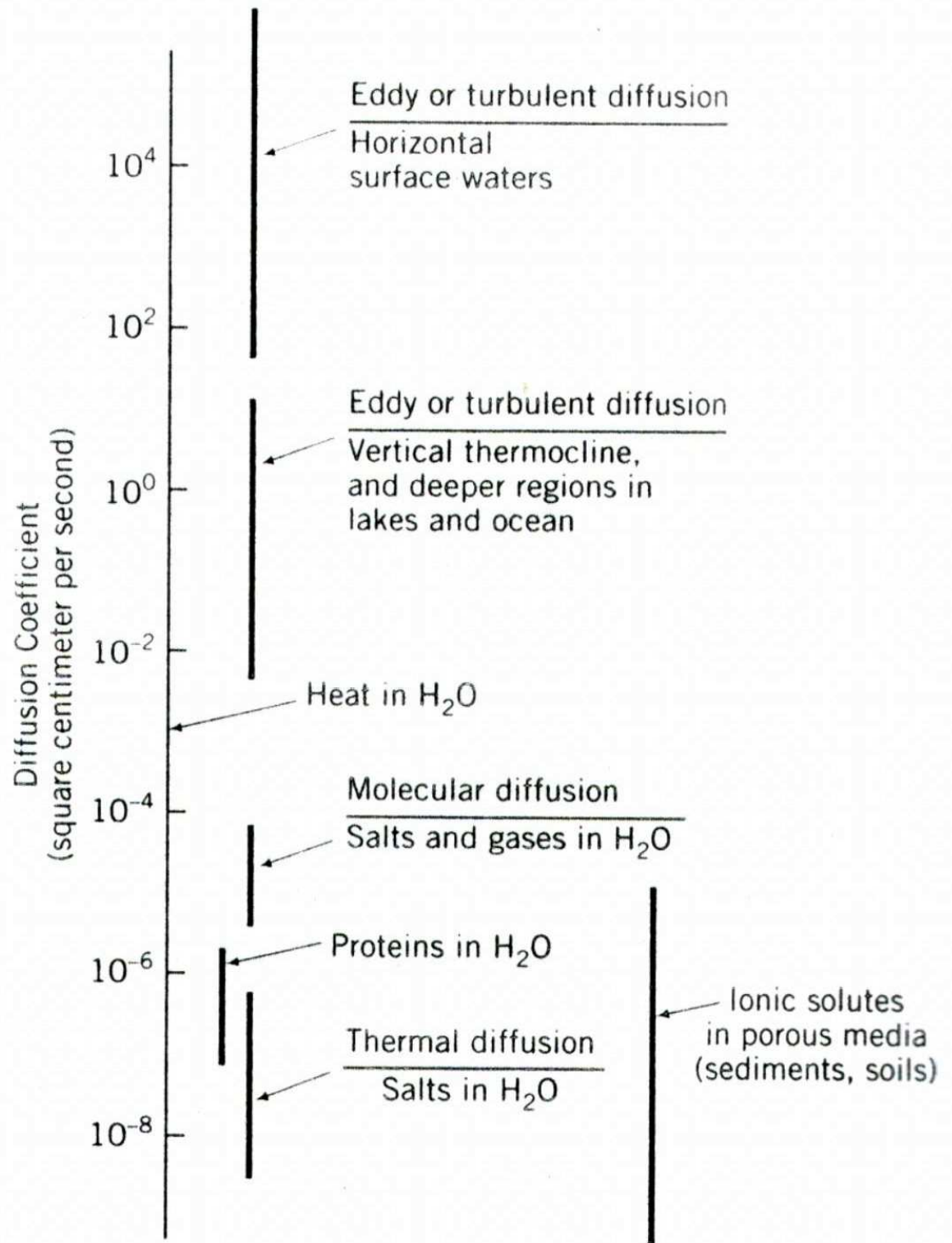
horninové prostředí

- efektivní difuzivní koeficient ... D'_d

$$D'_d = \frac{n}{\tau} D_d$$

- obecně roste s rostoucí porozitou prostředí

- hodnoty difuzivního koeficientu iontů klesají s rostoucím počtem nábojů
- nejčastěji v řádu 10^{-6} cm^2/s
- $5 \times 10^{-6} - 20 \times 10^{-6}$ cm^2/s
- nejvyšší hodnoty mají H^+ a OH^-



řešení difúze při přesné hranici a počátečních podmínkách

$$C_i(x,t) = C_0 \cdot \operatorname{erfc} \frac{x}{2(D'_d \cdot t)^{0,5}}$$

- C_i koncentrace ve vzdálenosti x v čase t od zahájení difúzního pohybu
 C_0 počáteční koncentrace která zůstává konstantní ve zdroji
erfc komplementární chybová funkce

komplementární chybová funkce

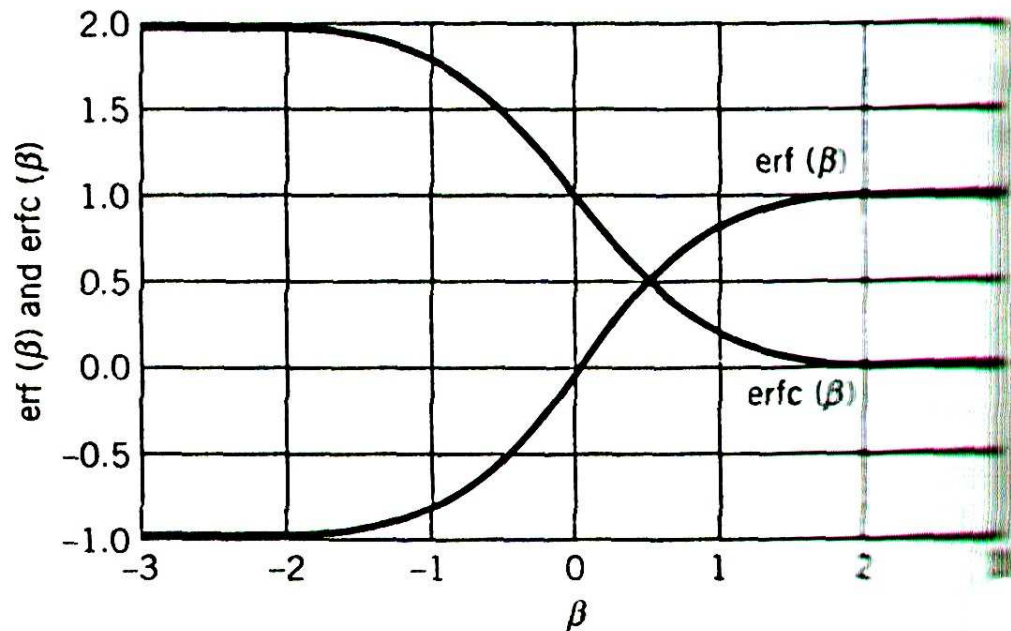
- spojena s normálním (Gaussovým) rozdělením hodnot
- tabelována

Komplementární chybová funkce

$$\operatorname{erfc}(-\beta) = 1 + \operatorname{erf}(\beta)$$

$$\operatorname{erf}(-\beta) = -\operatorname{erf}(\beta)$$

$$\operatorname{erfc}(\beta) = 1 - \operatorname{erf}(\beta)$$



β	$\operatorname{erf}(\beta)$	$\operatorname{erfc}(\beta)$
0	0	1.0
0.05	0.056372	0.943628
0.1	0.112463	0.887537
0.15	0.167996	0.832004
0.2	0.222703	0.777297
0.25	0.276326	0.723674
0.3	0.328627	0.671373
0.35	0.379382	0.620618
0.4	0.428392	0.571608
0.45	0.475482	0.524518
0.5	0.520500	0.479500
0.55	0.563323	0.436677
0.6	0.603856	0.396144
0.65	0.642029	0.357971
0.7	0.677801	0.322199
0.75	0.711156	0.288844
0.8	0.742101	0.257899
0.85	0.770668	0.229332
0.9	0.796908	0.203092
0.95	0.820891	0.179109
1.0	0.842701	0.157299
1.1	0.880205	0.119795
1.2	0.910314	0.089686
1.3	0.934008	0.065992
1.4	0.952285	0.047715
1.5	0.966105	0.033895
1.6	0.976348	0.023652
1.7	0.983790	0.016210
1.8	0.989091	0.010909
1.9	0.992790	0.007210
2.0	0.995322	0.004678
2.1	0.997021	0.002979
2.2	0.998137	0.001863
2.3	0.998857	0.001143
2.4	0.999311	0.000689
2.5	0.999593	0.000407
2.6	0.999764	0.000236
2.7	0.999866	0.000134
2.8	0.999925	0.000075
2.9	0.999959	0.000041
3.0	0.999978	0.000022



HYDRODYNAMICKÁ DISPERZE

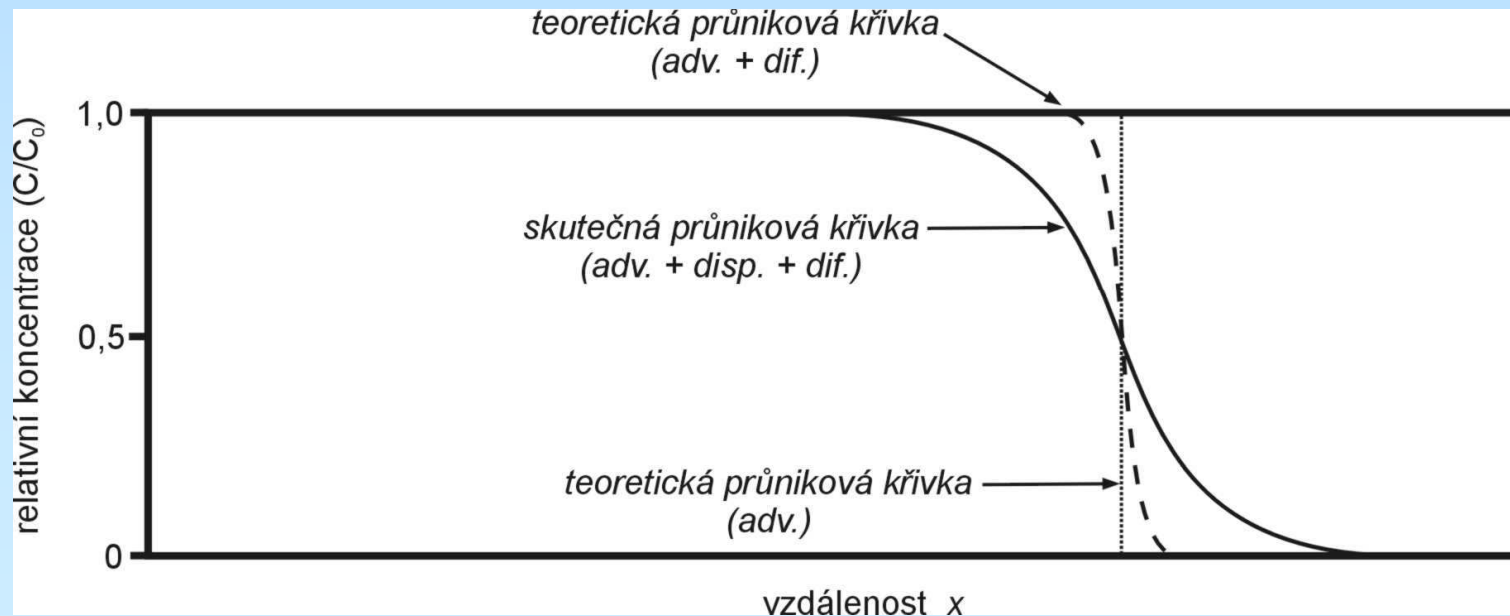
- společně s difúzí – neoddělitelné procesy
- v 3-D systému ve všech směrech (x, y, z)
- nejčastěji tzv. podélná (longitudinální – paralelní s hlavním směrem proudění)
a příčná disperzivita (transverzální – kolmá na směry proudění)

$$D_L = \alpha_L \cdot v_i + D'_d$$

D ... koeficient hydrodynamické disperze [m²/s]

$$D_T = \alpha_T \cdot v_i + D'_d$$

α ... disperzivita [m]

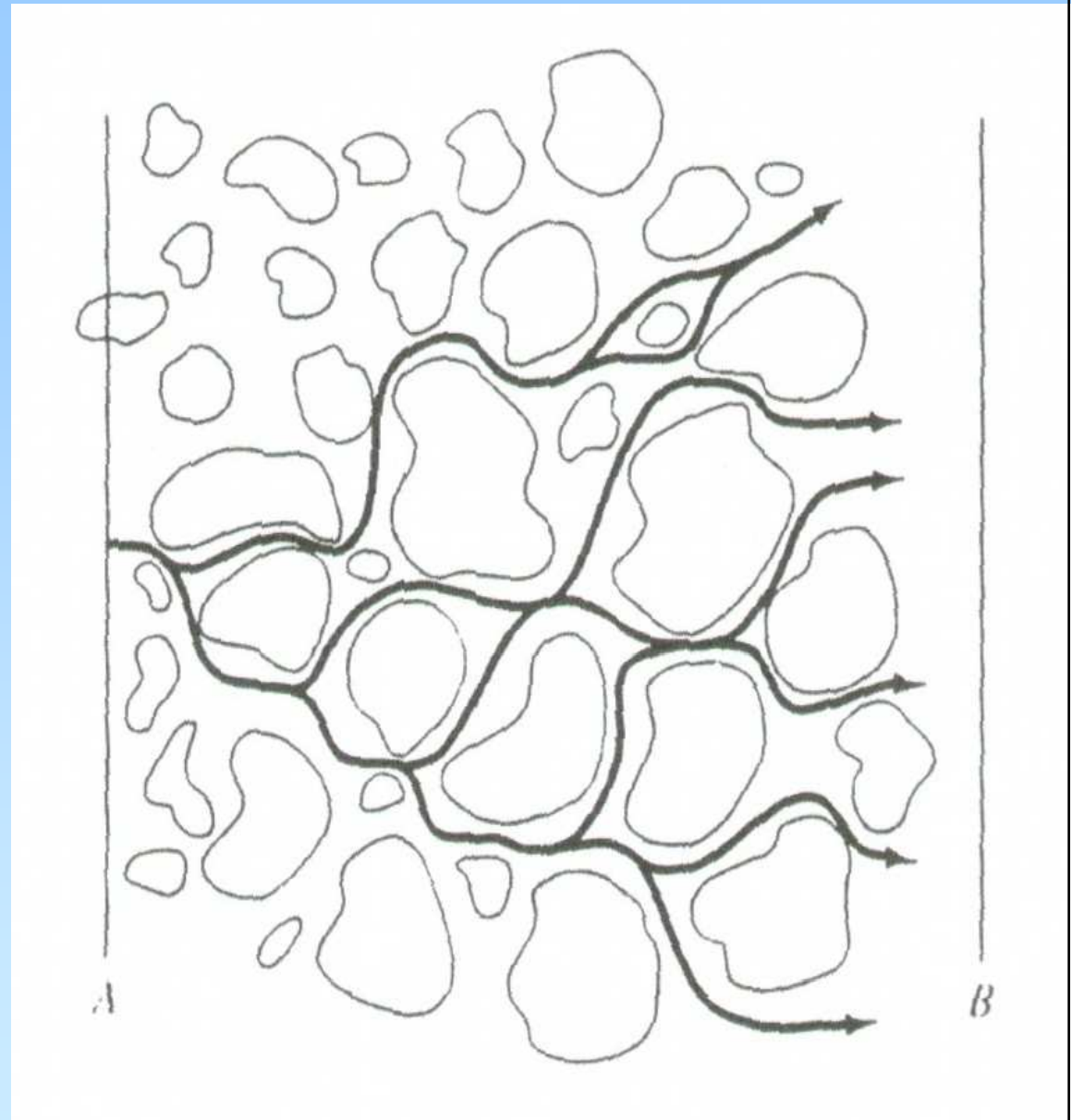


popis mechanismů disperze

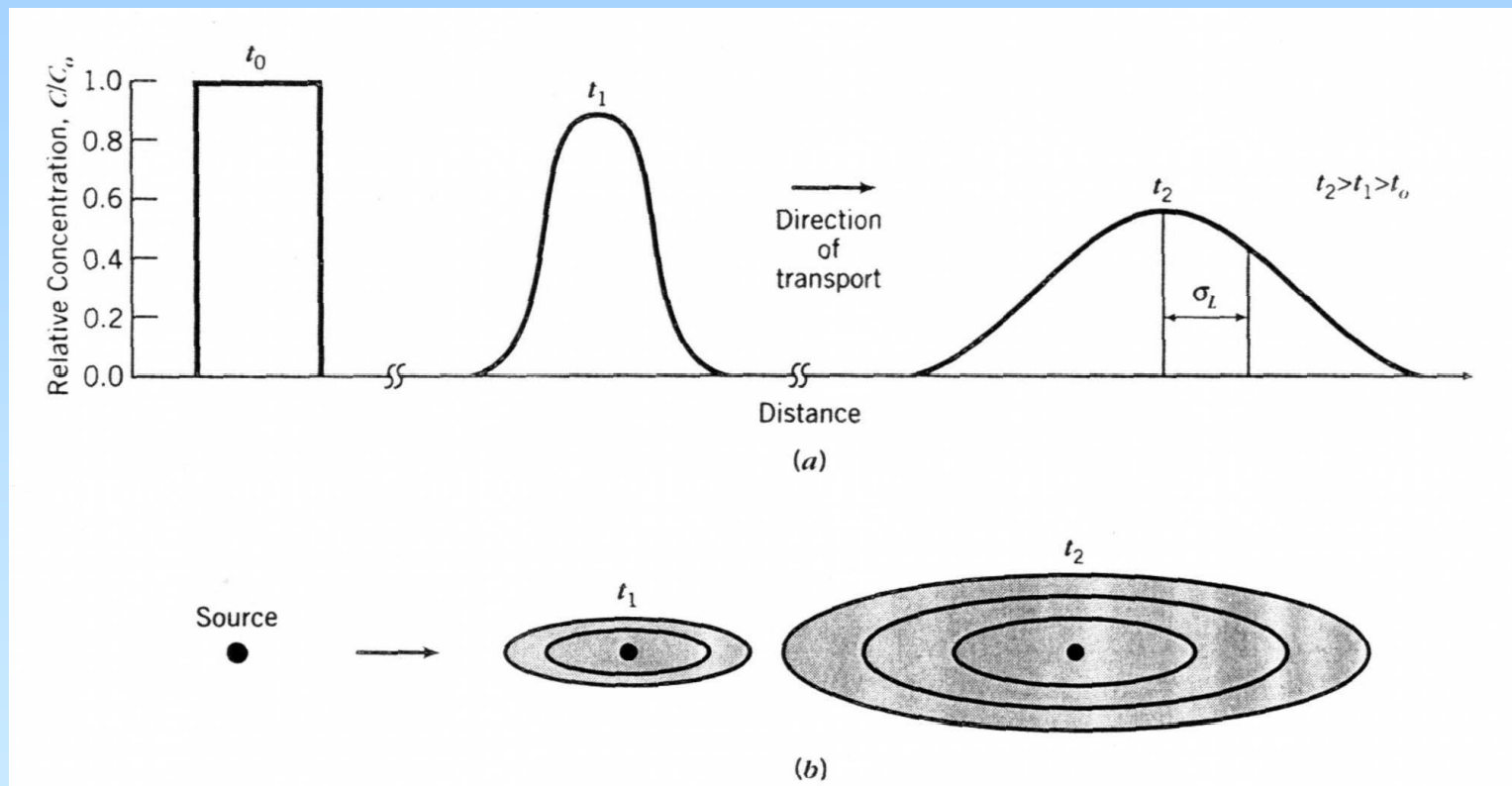
mikrodisperze x makrodisperze

- nehomogenity v kolektorech
- vliv variabilní rychlosti proudění v pórech (vliv velikosti pórů a „kanálků“)
- vliv tvaru „kanálků“

vliv distribuce vektoru rychlosti v pórech

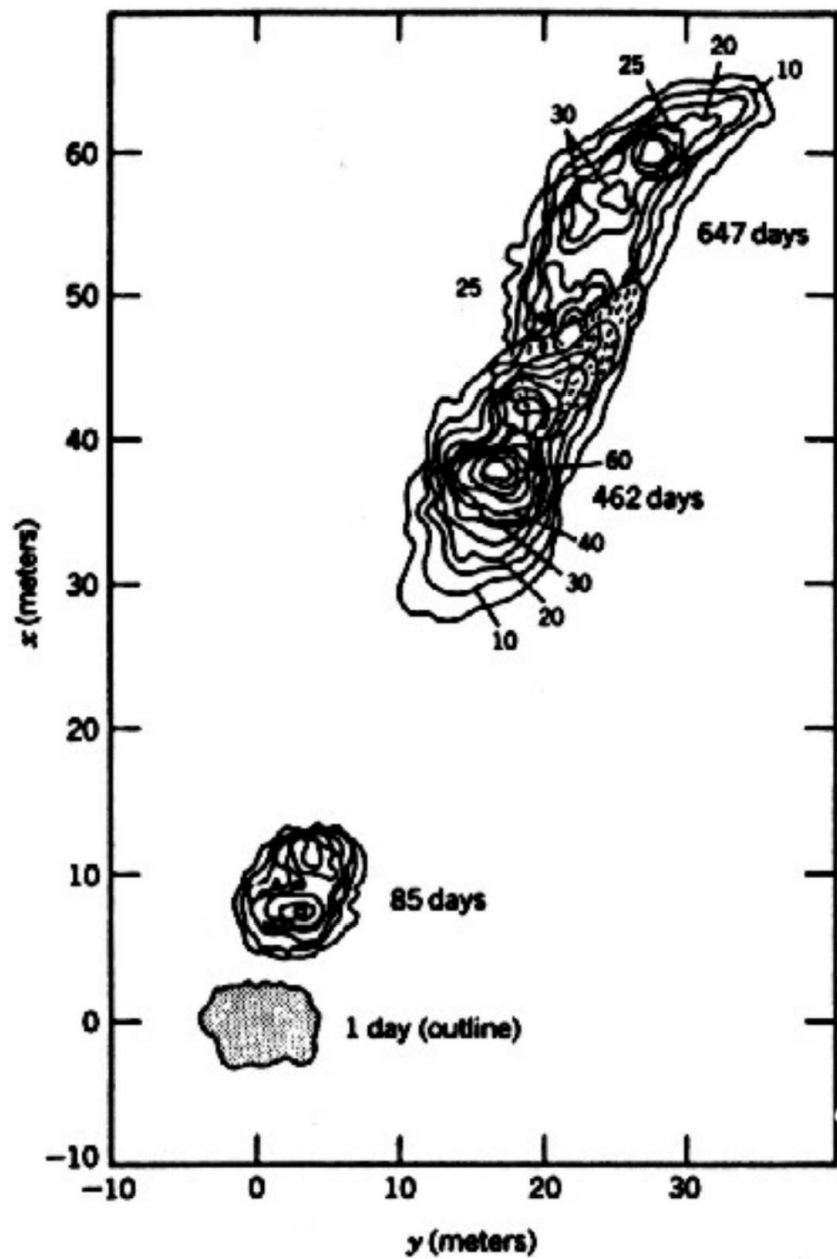


- šíření (rozptyl) tělesa rozpuštěné látky podléhajícího hydrodynamické disperzi je možné popsat rovněž pomocí Gaussova rozdělení
- charakteristika souboru pomocí aritmetického průměru a rozptylu
- s rostoucím časem (vzdáleností) klesá maximální koncentrace (a tím i poměr C/C_0)



$$D_L = \frac{\sigma_L^2}{2 \cdot t}$$

$$D_T = \frac{\sigma_T^2}{2 \cdot t}$$



Koncentrace stopovací látky v různých časech od injektáže - vliv podélné a příčné disperze (Mackay et al. 1986)

Srovnání vlivů disperze a difúze s advekcí

Pekletovo číslo

- bezrozměrné číslo udávající efektivitu přenosu hmoty advekcí ve srovnání s disperzí a difúzí

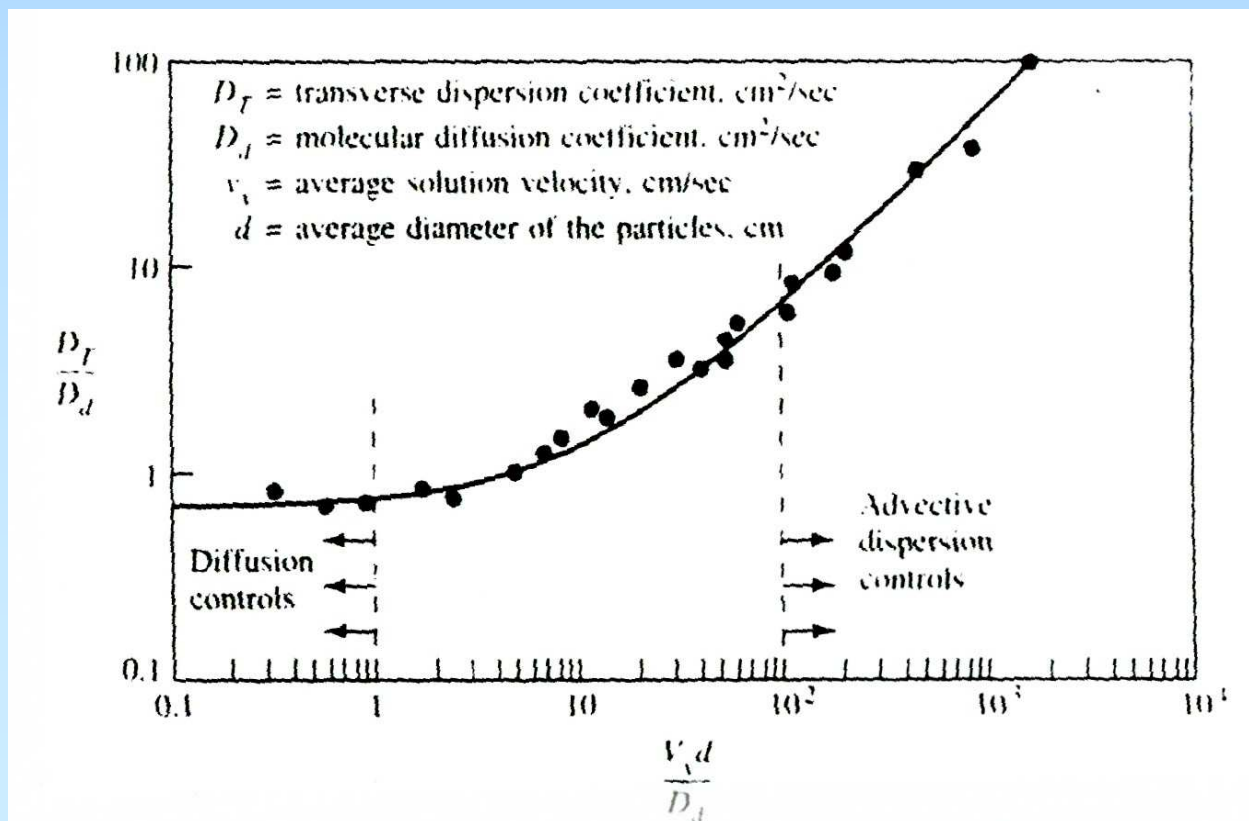
-obecná forma $P = v_x \cdot d / D_d$ (difúze) $P = v_x \cdot d / D_L$ (podélná disperze)

- obecně - nárůst vlivu advekce s rostoucí rychlostí proudění

- nízké rychlosti – větší vliv difúze

- experimentálně ověřená hodnota P při velmi nízkých rychlostech je 0,7

- při hodnotách 0,4 – 6 je vliv difúze roven vlivu podélné disperze



METODY STANOVENÍ HODNOT DISPERZIVITY

- laboratorní stanovení v kolonách
- empirické vzorce
- stanovení metodou jednoho vrtu
- stanovení metodou dvou vrtů
- stanovení z kontaminačních mraků
- stanovení stochastickými metodami
- dopočítání hodnot při modelování – úpravou jiných parametrů zvodněného prostředí

Odvození obecných advekčně – disperzních rovnic přenosu rozpuštěných látek

$$-v_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

Řešení – známé okrajové podmínky

1. typu - konstantní koncentrace (např. laboratorní kolony – 1-D)
2. typu - konstantní gradient koncentrace (např. liniový zdroj – kanál – 1-D)
3. typu - proměnlivá koncentrace (např. pulzační zdroj)

Řešení pro okrajovou podmínku 1. typu v 1-D systému

$$C = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{L - v_x \cdot t}{2\sqrt{D_L \cdot t}} \right) + \exp \left(\frac{v_x \cdot L}{D_L} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{L + v_x \cdot t}{2\sqrt{D_L \cdot t}} \right) \right]$$

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{L - v_x \cdot t}{2\sqrt{D_L \cdot t}} \right) \right]$$

$$D_L = \alpha_L v_i + D_d^*$$

$$D_T = \alpha_T v_i + D_d^*$$

$$\sqrt{(D \cdot t)} \approx \sqrt{(\alpha_x \cdot vt)}$$

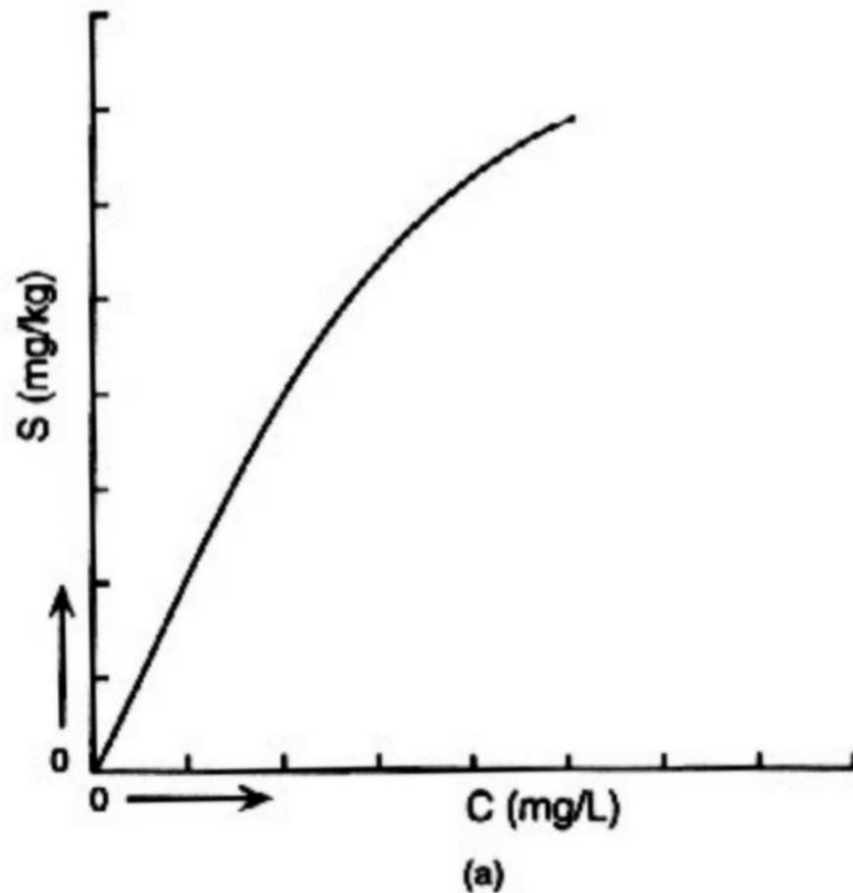
$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{L - v_x \cdot t}{2\sqrt{\alpha_x \cdot v_x t}} \right) \right]$$

tato rovnice má omezené praktické použití

VLIV SORPCE – RETARDACE ROZPUŠTĚNÝCH LÁTEK

- popis pomocí tzv. rozdělovacího (distribučního) koeficientu – K_d [L/kg, mL/g]

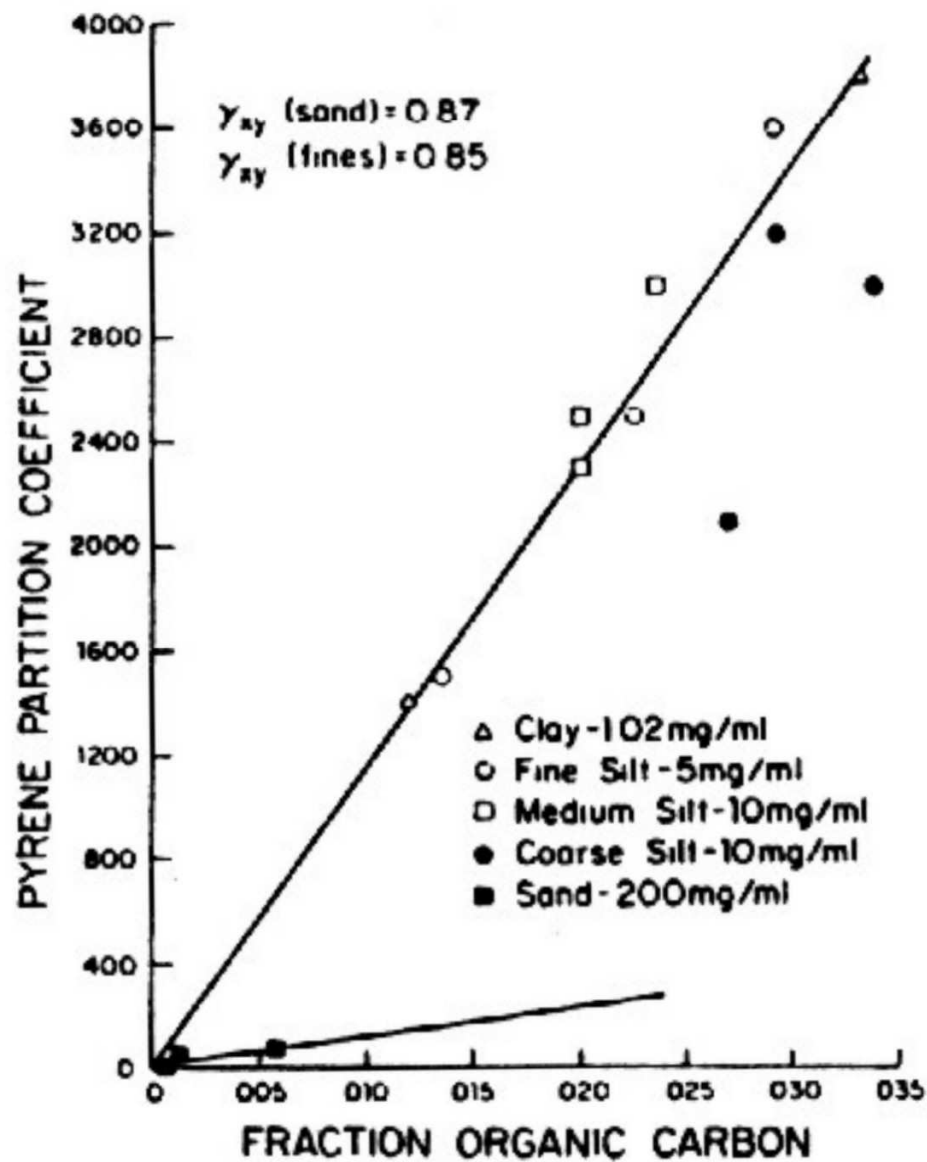
$$K_d = dS / dC$$



Freundlichova sorpční izoterma

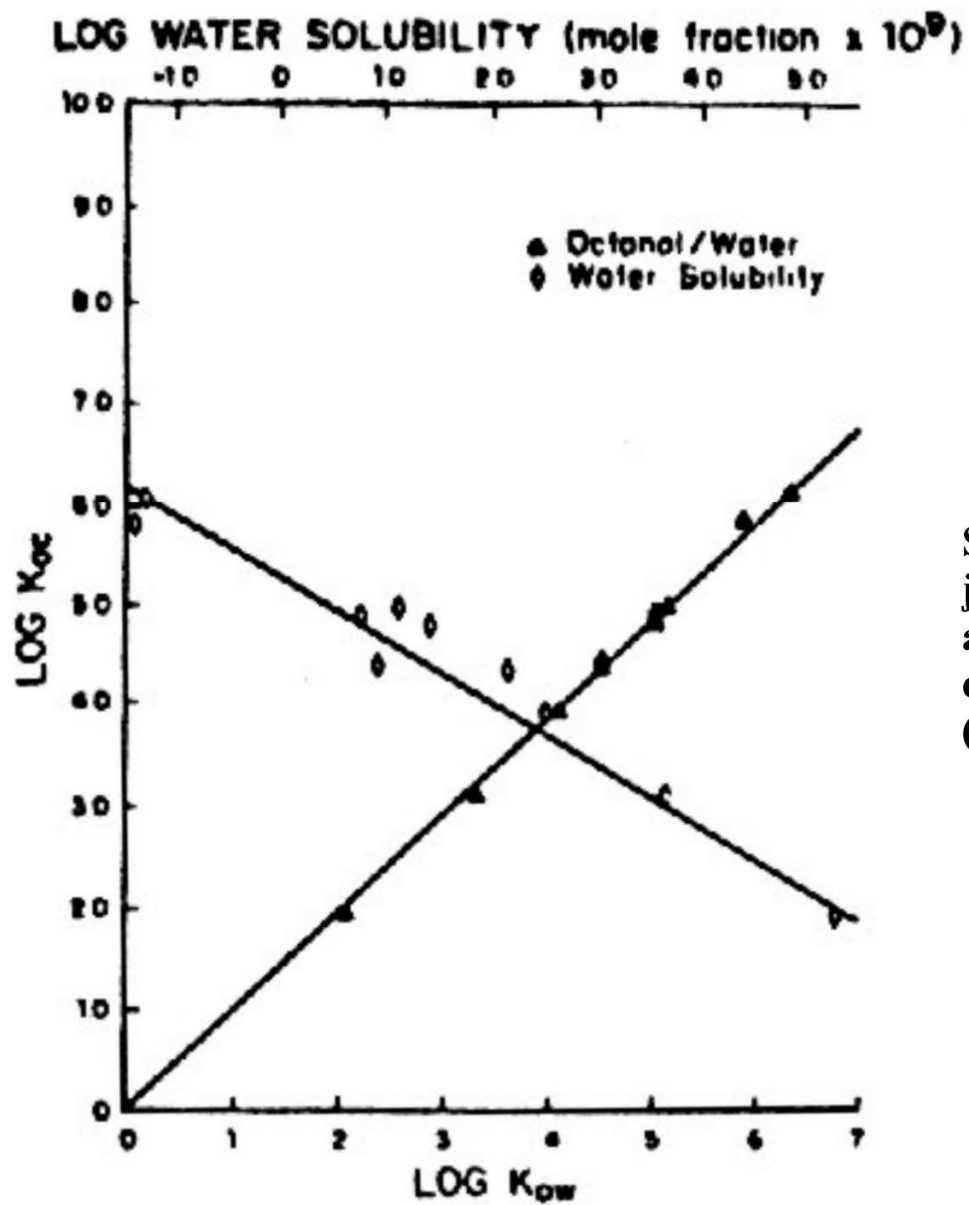
- odlišné mechanismy sorpce organických a anorganických látek
- pro organické – **hydrofobní teorie** – Karickhoff et al. 1979 – sorpce na pevné látky je téměř výhradně na organický uhlík
- experimenty při $f_{oc} > 1$ % váhy půdy nebo zvodněné horniny (sedimenty říční, kaly, rybníční, apod.) s použitím polycyklických aromatických uhlovodíků a chlorovaných uhlovodíků
- podle Schwarzenbacha a Westalla platí při $f_{oc} > 0,001$
- zjistil lineární vztah mezi množstvím organického uhlíku a distribučním (rozdělovacím) koeficientem K_d a jednoduše určil konstantu K_{oc} (rozdělovací koeficient organický uhlík) podle vztahu $K_d = K_{oc} \cdot f_{oc}$
- ze vztahu vyplývá, že látky s vyššími hodnotami K_{oc} se více sorbují a jsou tudíž méně mobilní

$$K_{oc} = K_{om} \cdot 1,724$$



Distribuční (rozdělovací) koeficient
 pyrenu jako funkce
 množství organického uhlíku v sedimentu
 (Karickhoff et al. 1979)

- zjistil i dobrou korelaci mezi hodnotami K_{oc} a K_{ow} , případně další autoři s hodnotami S (rozpustnosti) empirické vzorce – platí pro organické látky špatně rozpustné ve vodě, ale dobře rozpustné v organických rozpouštědlech (např. oktanol)
- vztahy studovali i další autoři v různých laboratorních podmínkách – proto jsou v literatuře odlišné hodnoty K_{oc} pro různé látky – výsledky konkrétních experimentů, při experimentech se postupovalo opačně – určila se hodnota K_d , bylo známo f_{oc} a K_{oc} se jen dopočítalo
- ukázalo se že lineární sorpční izoterma není nejvhodnější, zejména při vyšších koncentracích kontaminantů se sorbovalo menší množství látky (hranice se liší – např. PCE 1 mg/l), proto je vhodnější aproximovat zjištěné koncentrace k Freundlichově nebo Langmuirově sorpční izotermě



Sorpční konstanta
 jako funkce rozpustnosti organické sloučeniny
 a distribučního (rozdělovacího) koeficientu
 oktanol/voda
 (Karickhoff et al. 1979)

Projevy sorpce

- pozorovatelné pouze na čele migrujícího tělesa látky rozpuštěné v podzemní vodě, na čele kontaminovaného pruhu
- způsobují „zpoždování“ čela kontaminovaného pruhu kontaminantů, které se sorbují
- rychlost pohybu všech látek rozpuštěných v podzemní vodě nemusí být stejná
- v praxi proto kalkulace tzv. retardačního faktoru – určuje, kolikrát je rychlost pohybu dané látky pomalejší ve srovnání s rychlostí proudění podzemní vody

vzorec Freeze a Cherry – lineární

$$R = \frac{v}{v_c} \left(\text{ev. } \frac{t}{t_c} \right) = 1 + \frac{\rho_b}{n} \cdot K_d$$

Freundlichova

- je-li tedy K_d rovno 0, kontaminant migruje stejně rychle jako proudí podzemní voda
- zpravidla jsou však kalkulované hodnoty R odlišné (nižší – až několikanásobně) než skutečné – to souvisí už s nižšími hodnotami K_d , než jaké jsou ve skutečnosti (způsobeno dobou experimentů pro určení K_d nebo K_{oc} – nestačí se ustanovit sorpční rovnováha a to ve svém důsledku vede k podhodnocení sorpce)

- navíc se hodnoty f_{oc} v přírodních podmínkách často výrazně mění a obsahy mohou být i pod 0,1 %, potom sorpce převážně na bobtnavé jílové minerály
- zaměnitelné i s projevy biodegradace – musí se sledovat i dceřinné produkty
- působí souběžně s disperzí a difúzí – neoddělitelné
- nedostatky v modelování – pohyb sorbované látky není častí ideální – projevuje se rychlejším nebo častěji pomalejším průtokem v pozorovacím vrtu situovaném pod místem injektáže (vlivy mikro i makro)
- mikrovlivy – nelinearita sorpční izotermy, nerovnovážná sorpce, hystereze v adsorpčních a desorpčních izotermách (desorpce je pomalejší – přiteče to později), kineticky zpomalená sorpce (přiteče to rychleji)
- makrovlivy – prostorová variabilita k_f a K_d , typický příklad zvrstvené sedimenty

další vlivy – geochemické parametry (pH, teplota, iontová síla roztoku, apod.), suspenze a koloidy organických látek (množství a druh) – zejména rozpuštěné makromolekulární organické látky zvyšují mobilitu organických kontaminantů a usnadňují jejich migraci - platí však jen pro silně hydrofobní látky s hodnotami $\log K_{ow}$ nad 4 – 5.

VÝPOČET RETARDAČNÍHO FAKTORU PODLE KORELACE S HODNOTAMI ROZPUSTNOSTI

TABLE 3.4 Experimentally derived K_{oc} values.

Compound	K_{oc}	Reference
Benzene	1.50	Chiou, Porter, and Schmedding 1983
	1.92	Karickhoff, Brown, and Scott 1979
	1.98	Rogers, McFarlane, and Cross 1980
Ethylbenzene	2.22	Chiou, Porter, and Schmedding 1983
2,2'-Dichlorobiphenyl	3.92	Chiou, Porter, and Schmedding 1983
Tetrachloroethene	2.32	Chiou, Peters, and Freed 1979
Napthalene	3.11	Karickhoff, Brown, and Scott 1979
Pyrene	4.92	Karickhoff, Brown, and Scott 1979
	4.80	Means et al. 1980

TABLE 3.5 Empirical equations by which K_{oc} can be estimated from S .

Equation Number	Equation	Reference
(T13)	$\log K_{oc} = 0.44 - 0.54 \log S$ S in mole fraction, $r^2 = 0.94$	Karickhoff, Brown, and Scott 1979
(T14)	$\log K_{oc} = 3.64 - 0.55 \log S$ S in mg/L	Kenaga 1980
(T15)	$\log K_{oc} = 4.273 - 0.686 \log S$ S in mg/L	Means et al. 1980
(T16)	$\log K_{oc} = 3.95 - 0.62 \log S$ S in mg/L	Hassett et al. 1983
(T17)	$\log K_{oc} = 0.001 - 0.729 \log S$ S in moles/L, $r^2 = 0.996$	Chiou, Porter, and Schmedding 1983

VÝPOČET RETARDAČNÍHO FAKTORU PODLE KORELACE S HODNOTAMI ROZPUSTNOSTI

TABLE 3.6 K_{oc} values estimated from the aqueous solubility.

Compound:	Dichloroethane	Benzene	Trichloroethene	Ethyl Benzene	Tetrachloroethene	Napthalene	2,2'-Dichlorobiphenyl	Pyrene
Molecular weight:	98.96	78.12	131.38	165.82	106.18	128.18	223.10	202.26
	Solubility (mg/L)							
Log S:	5500	1780	1100	140	150	31	1.86	0.032
	3.74	3.25	3.04	2.15	2.18	1.49	0.269	-1.50
	Solubility (moles/L)							
Log S:	5.56×10^{-2}	2.28×10^{-2}	8.37×10^{-3}	8.44×10^{-4}	1.41×10^{-3}	2.42×10^{-4}	8.32×10^{-6}	1.58×10^{-7}
	-1.25	-1.64	-2.08	-3.07	-2.85	-3.62	-5.08	-6.80
	Solubility (Mole Fractions)							
Log S:	1.00×10^{-3}	4.10×10^{-4}	1.51×10^{-4}	1.52×10^{-5}	2.54×10^{-5}	4.35×10^{-6}	1.49×10^{-7}	2.84×10^{-9}
	-3.00	-3.39	-3.82	-4.82	-4.60	-5.36	-6.83	-8.55
Equation Number^a	Estimated log K_{oc}							
(T13)	2.06	2.27	2.50	3.04	2.87	2.82	4.13	5.06
(T14)	1.58	1.85	1.97	2.46	2.44	2.82	3.79	4.47
(T15)								
(T15)	1.67	2.01	2.15	2.76	2.74	3.21	4.46	5.27
(T16)	1.63	1.94	2.07	2.62	2.60	3.03	4.12	4.88
(T17)	1.15	1.43	1.75	2.47	2.31	2.88	3.93	5.19
Range	1.15-2.06	1.43-2.27	1.75-2.50	1.80-3.04	2.31-2.87	2.82-3.33	3.79-4.46	4.47-5.27
Mean	1.62	1.90	2.09	2.67	2.59	3.05	4.09	4.97
St. dev.	0.32	0.31	0.27	0.24	0.22	0.22	0.25	0.32
Coef. var	0.08	0.07	0.06	0.05	0.04	0.04	0.05	0.08

^a The equation numbers in this table refer to Table 3.5.

VÝPOČET RETARDAČNÍHO FAKTORU PODLE KORELACE S HODNOTAMI K_{ow}

TABLE 3.2 Equations for estimating K_{oc} from K_{ow} .

Equation Number	Equation	Chemicals Used	Reference
(T1)	$\log K_{om} = 0.52 \log K_{ow} + 0.62$	72 substituted benzene pesticides	Briggs, 1981
(T2)	$\log K_{oc} = 1.00 \log K_{ow} - 0.21$	10 polyaromatic hydrocarbons	Karickhoff, Brown, and Scott 1979
(T3)	$K_{oc} = 0.63K_{ow}$	Miscellaneous organics	Karickhoff, Brown, and Scott 1979
(T4)	$\log K_{oc} = 0.544 \log K_{ow} + 1.377$	45 organics, mostly pesticides	Kenaga and Goring 1980
(T5)	$\log K_{oc} = 1.029 \log K_{ow} - 0.18$ $r^2 = 0.91; n = 13$	13 pesticides	Rao and Davidson 1980
(T6)	$\log K_{oc} = 0.94 \log K_{ow} + 0.22$	s-triazines and dinitroanilines	Rao and Davidson 1980
(T7)	$\log K_{oc} = 0.989 \log K_{ow} - 0.346$ $r^2 = 0.991; n = 5$	5 polyaromatic hydrocarbons	Karickhoff 1981
(T8)	$\log K_{oc} = 0.937 \log K_{ow} - 0.006$	Aromatics, polyaromatics, triazines	Lyman 1982
(T9)	$\ln K_{oc} = \ln K_{ow} - 0.7301$	DDT, tetrachlorobiphenyl, lindane, 2,4-D, and dichloropropane	McCall, Swann, and Laskowski 1983
(T10)	$\log K_{om} = 0.904 \log K_{ow} - 0.779$ $r^2 = 0.989; n = 12$	Benzene, chlorinated benzenes, PCBs	Chiou, Porter, and Schmedding 1983
(T11)	$\log K_{oc} = 0.72 \log K_{ow} + 0.49$ $r^2 = 0.95; n = 13$	Methylated and chlorinated benzenes	Schwarzenbach and Westall 1981
(T12)	$\log K_{oc} = 1.00 \log K_{ow} - 0.317$ $r^2 = 0.98; n = 22$	22 polynuclear aromatics	Hassett et al. 1980

VÝPOČET RETARDAČNÍHO FAKTORU PODLE KORELACE S HODNOTAMI K_{ow}

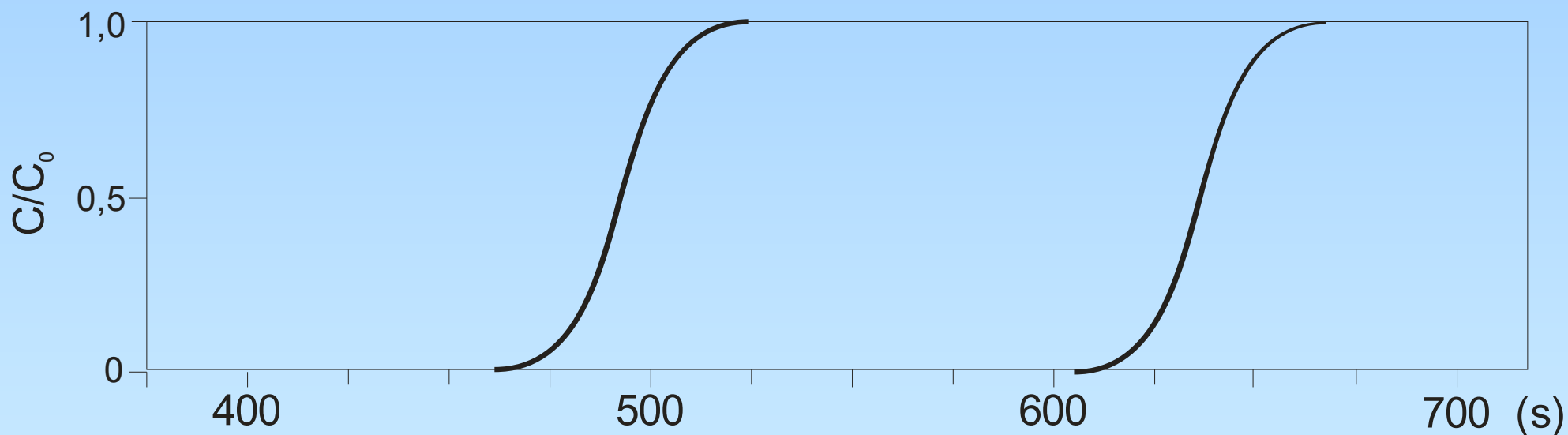
TABLE 3.3 Estimated values of K_{oc} based on published K_{ow} values.

	Dichloroethane	Benzene	Trichloroethene	Ethyl Benzene	Tetrachloroethene	Napthalene	2,2'-Dichlorobiphenyl	Pyrene
Log K_{ow}	1.79	2.13	2.29	3.14	3.40	3.37	4.80	5.32
Equation Number ^a	Estimated K_{oc}							
(T1)	1.79	1.96	2.05	2.49	2.62	2.61	3.35	3.62
(T2)	1.58	1.92	2.10	2.93	3.19	3.16	4.59	5.11
(T3)	1.13	1.34	1.44	1.98	2.14	2.16	3.07	3.35
(T4)	2.35	2.54	2.62	3.09	3.23	3.21	3.99	4.27
(T5)	1.66	2.01	2.18	3.05	3.32	3.29	4.76	5.29
(T6)	1.90	2.22	2.37	3.17	3.42	3.39	4.73	5.22
(T7)	1.42	1.76	1.92	2.76	3.02	2.99	4.40	4.92
(T8)	1.67	1.99	2.14	2.94	3.18	3.15	4.49	4.98
(T9)	1.06	1.40	1.56	2.41	2.67	2.64	4.07	4.59
(T10)	1.08	1.39	1.53	2.06	2.30	2.51	3.80	4.27
(T11)	1.78	2.02	2.14	2.75	2.94	2.92	3.95	4.32
(T12)	1.47	1.81	1.97	2.82	3.08	3.05	4.48	5.00
Range	1.06–2.35	1.34–2.54	1.44–2.62	1.98–3.17	2.14–3.42	2.16–3.39	3.07–4.76	3.35–5.29
Mean	1.57	1.86	2.00	2.70	2.93	2.92	4.14	4.58
St. dev.	0.38	0.35	0.33	0.39	0.41	0.37	0.54	0.63
Coef. var.	0.24	0.19	0.17	0.14	0.15	0.13	0.13	0.14

The equation numbers in this table refer to Table 3.2

VÝPOČET RETARDAČNÍHO FAKTORU Z LABORATORNÍCH KOLON

- současné zavedení konzervativního stopovače a sorbující se látky do kolony
- konstantní rychlost proudění
- sledování koncentrací na odtoku z kolony a konstrukce průnikové křivky



- z průnikové křivky odečteme čas příchodu normalizované koncentrace $C_{0,5}$ (advektivní fronta)

- výpočet hodnoty R podle vzorce
$$R = \frac{t_{0,5sorb}}{t_{0,5nesorb}}$$

VÝPOČET RETARDAČNÍHO FAKTORU Z LABORATORNÍCH KOLON

- známe-li současně i vlastnosti horniny v zemině, můžeme vypočítat K_d a u organických látek i K_{oc}

$$R = \frac{v_w}{v_c} = \frac{L_w}{L_c} = 1 + \left(\frac{\rho_b}{n} \right) \cdot K_d$$

- n - celková pórovitost
- ρ_b - měrná hmotnost horniny
 - hmotnost vysušeného vzorku / objem vzorku v přírodních podmínkách
 - hodnoty 1,6 – 2,1 g/cm³
- příklad

VÝPOČET RETARDAČNÍHO FAKTORU (EVENT. K_d) S POUŽITÍM TERÉNNÍCH DAT

- srovnání změn koncentrací látky v roztoku a sorbované v zemině po ustanovení nové rovnováhy

- použití vzorce
$$K_d = \frac{dS}{dC}$$

- při známých vlastnostech zeminy možný výpočet R

- příklad

VÝPOČET RETARDAČNÍHO FAKTORU (EVENT. K_d) S POUŽITÍM TERÉNNÍCH DAT

- 2-D (event. i 1-D) zobrazení kontaminačních mraků
- z analýzy pozice advekční fronty (event. maxima koncentrací) určíme hodnotu R
- podmínka – různě se sorbující látky se musely do zvodněného prostředí dostat ve stejném čase
- musí být přítomný konzervativní stopovač – výpočet rychlosti advekce

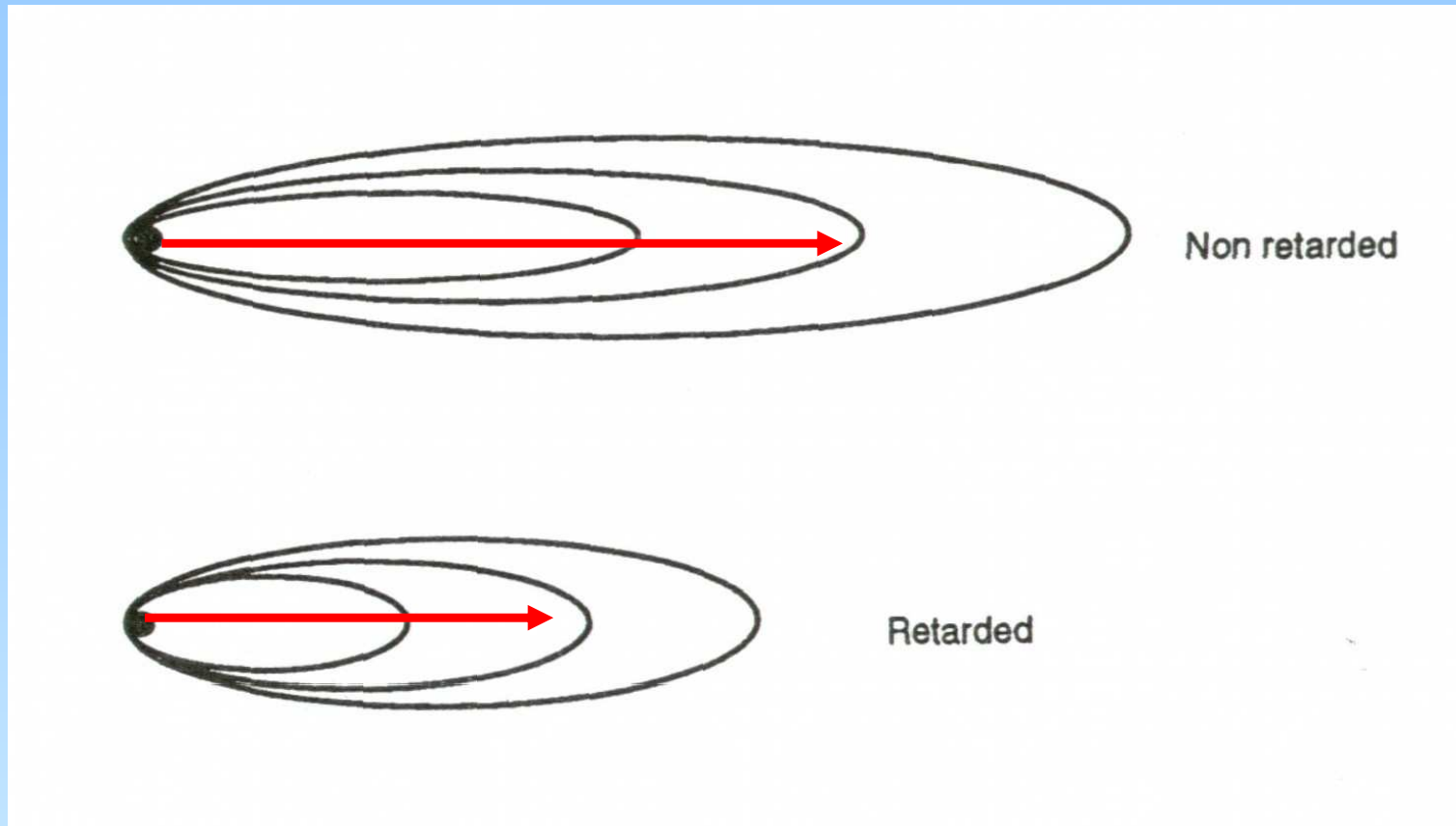
- použití vzorce

$$R = \frac{v_0}{v}$$

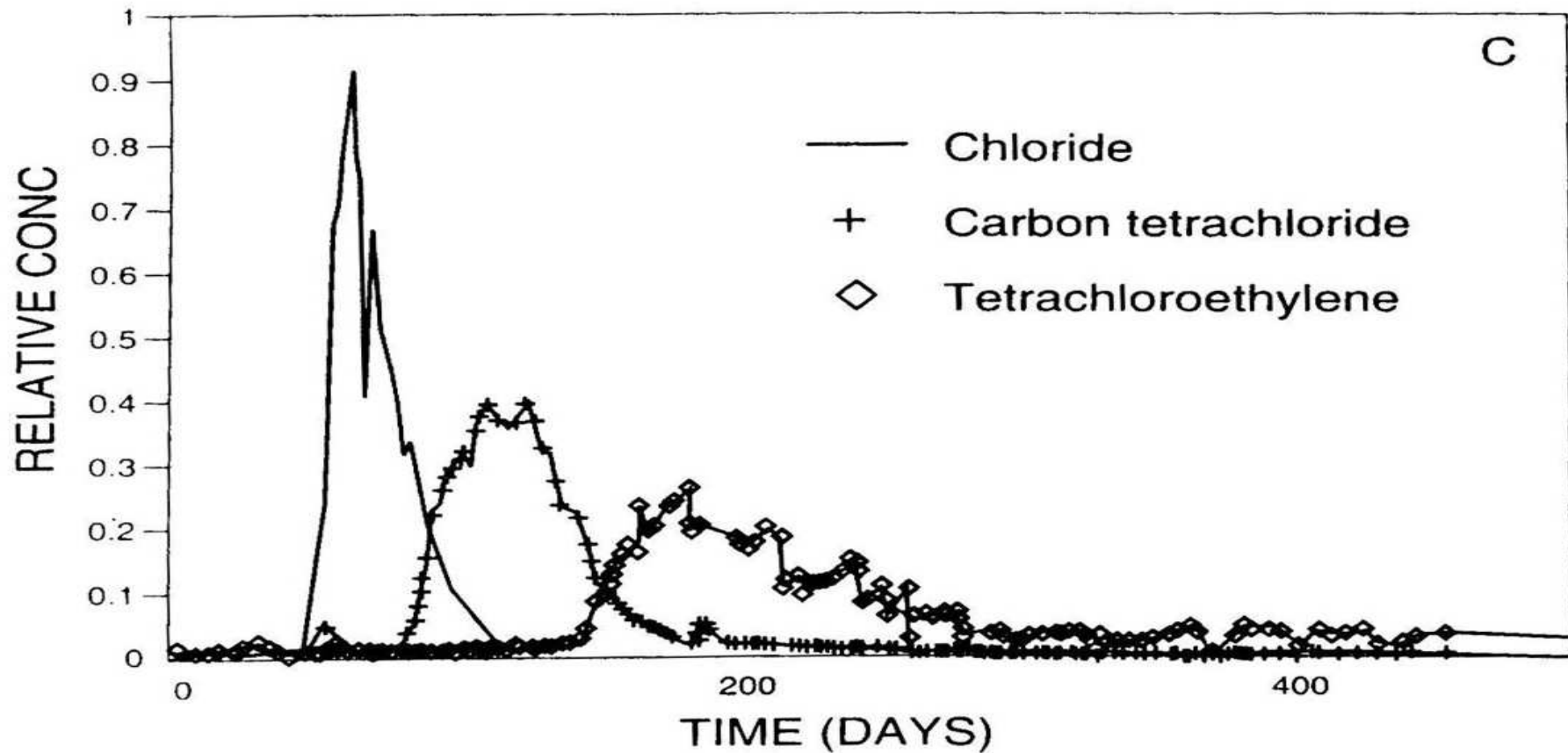
The diagram shows the equation $R = \frac{v_0}{v}$. The term v_0 in the numerator is circled in red. The term v in the denominator is enclosed in a large right-facing curly bracket. The entire equation is preceded by an equals sign.

- při známých vlastnostech zeminy možný výpočet K_d

- příklad

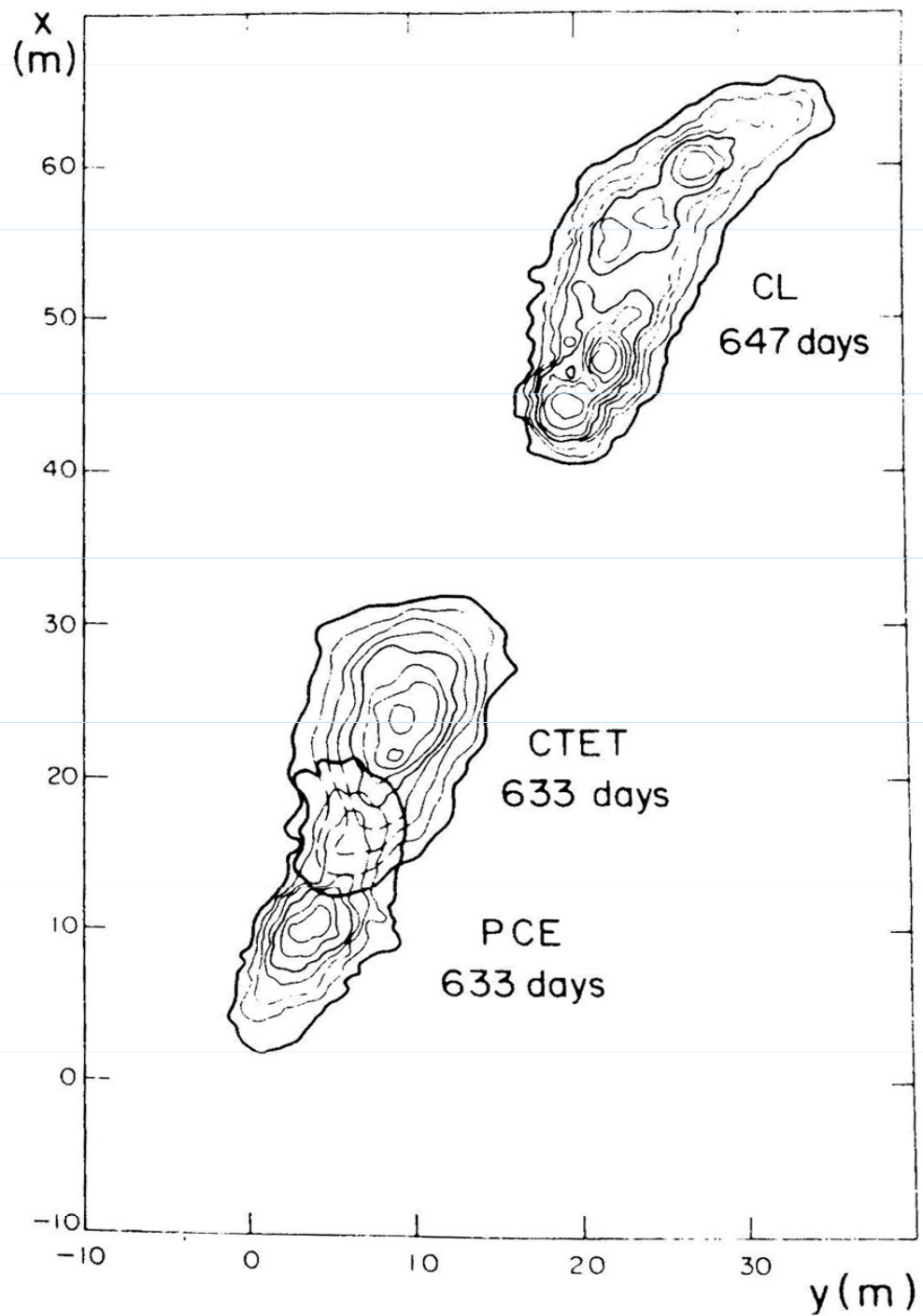


- 2-D zobrazení kontaminačních mraků
- $v_x = \text{konst.}$, čas $t \sim$ dráze L
- stálý zdroj – nutno nalézt čelo advekční fronty ($C/C_0 = 0,5$)



Koncentrace Cl^- , CCl_4 a PCE v monitorovacím vrtu vzdáleném 5 metrů od místa vstupu kontaminace (podle Roberts et al. 1986)

- 1-D zobrazení – jednorázový zdroj
- relativní koncentrace nedosahují 0,5 – nutné použít pro stanovení R maximální koncentrace



- 2-D zobrazení – jednorázový zdroj

- relativní koncentrace nedosahují 0,5 – nutné použít pro stanovení R maximální koncentrace

PROBLEMATIKA MIGRACE V PROSTŘEDÍ S BINÁRNÍ IONTOVOU VÝMĚNOU

- výraz pro R má jinou formu, zohlednění iontové výměny

$$\frac{K_s \cdot CEC}{\tau} = K_d \qquad \frac{v_w}{v_c} = 1 + \frac{\rho_b (1-n)}{n \cdot \tau} \cdot K_s \cdot CEC$$

K_s - selektivní koeficient

CEC - kationtová výměnná kapacita [meq/objem]

τ - celková koncentrace „soupeřících“ kationtů v roztoku [meq/objem]

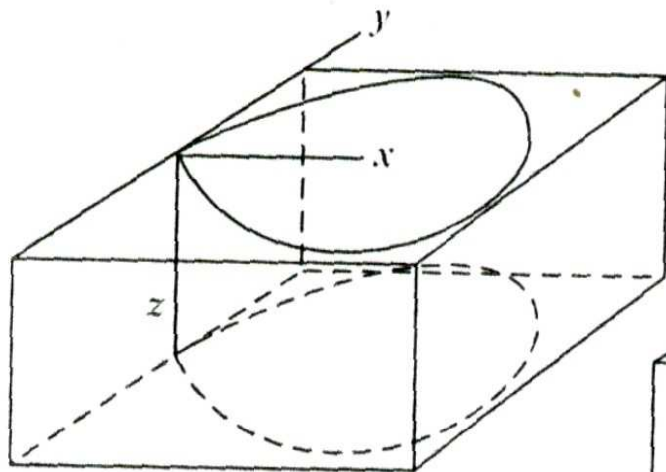
ρ_b - objemová hmotnost zeminy

Ve vzorci musí být použity hodnoty pro CEC a τ ve stejných jednotkách

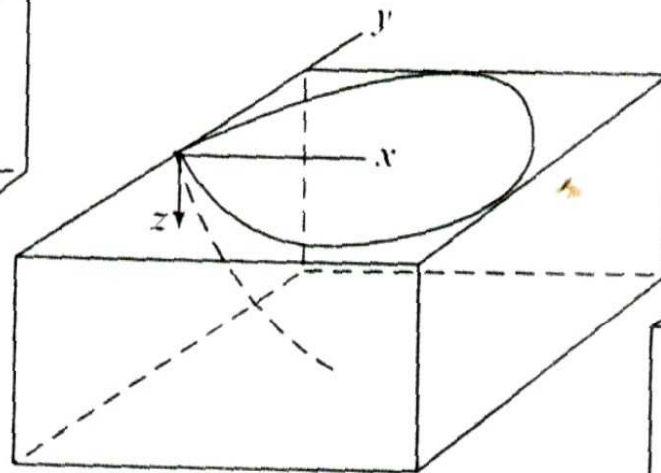
- příklad

ADVEKČNĚ - DISPERZNÍ ROVNICE

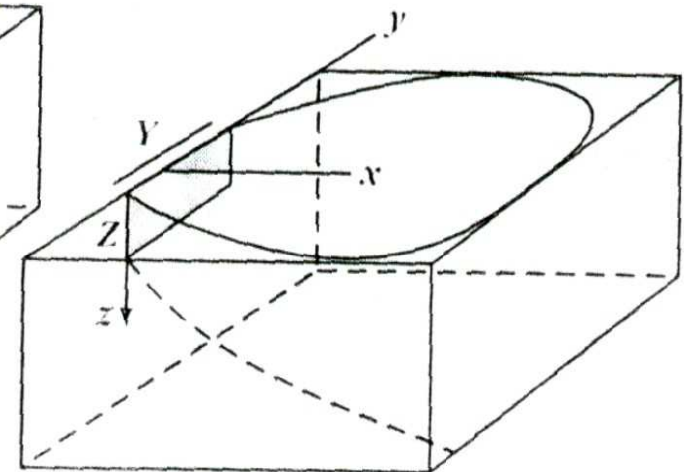
- při modelování šíření kontaminantů ve 2-D i 3-D systému (uvažování i příčné disperzivity) je nutné do úvah zahrnout i geometrii zdroje
- zjednodušení analytického řešení – kalkulace koncentrací v linii podélně se směrem proudění, kdy y a $z = 0$
- po určité době – ustálený stav (v určitém místě za advekční frontou se udržují konstantní koncentrace – erfc $\leq (-2)$)



(a)



(b)



(c)

1. proudění v trubici (celá průtočná plocha)

$$C_{\max} = C_0$$

2. liniový zdroj

$$C_{\max} = \frac{C_0 Q}{2\nu(\pi\alpha_y x)^{\frac{1}{2}}}$$

Q ... objemový průtok [m²/s]

3. bodový zdroj

$$C_{\max} = \frac{C_0 Q}{4x\pi\nu(\alpha_y\alpha_z)^{\frac{1}{2}}}$$

Q ... objemový průtok [m³/s]

4. plošný zdroj

- plošný zdroj – v praxi nejčastější případ
- těleso zasahující pod hladinu se souřadnicemi ve směru Y a Z

laterální šíření
ve směru osy y

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{(y + Y/2)}{2(\alpha_y x)^{\frac{1}{2}}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{(y - Y/2)}{2(\alpha_y x)^{\frac{1}{2}}} \right] \right\}$$

laterální šíření
ve směru osy z

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{(z + Z)}{2(\alpha_z x)^{\frac{1}{2}}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{(z - Z)}{2(\alpha_z x)^{\frac{1}{2}}} \right] \right\}$$

šíření ve směrech os y a z současně

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{4} \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{(y + Y/2)}{2(\alpha_y x)^{1/2}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{(y - Y/2)}{2(\alpha_y x)^{1/2}} \right] \right\} \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{(z + Z)}{2(\alpha_z x)^{1/2}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{(z - Z)}{2(\alpha_z x)^{1/2}} \right] \right\}$$

pro směr osy x ($y = z = 0$)

$$C_{\max} = C_0 \operatorname{erf} \left[\frac{Y}{4(\alpha_y x)^{1/2}} \right] \operatorname{erf} \left[\frac{Z}{2(\alpha_z x)^{1/2}} \right]$$

obecná úplná rovnice analytického řešení ve 3-D systému a plošném zdroji

$$\frac{C(x, y, z, t)}{C_0} = \frac{1}{8} \operatorname{erfc} \left[\frac{x - vt}{2(\alpha_x vt)^{\frac{1}{2}}} \right] \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{(y + Y/2)}{2(\alpha_y x)^{\frac{1}{2}}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{(y - Y/2)}{2(\alpha_y x)^{\frac{1}{2}}} \right] \right\} \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{(z + Z)}{2(\alpha_z x)^{\frac{1}{2}}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{(z - Z)}{2(\alpha_z x)^{\frac{1}{2}}} \right] \right\}$$

pro linii symetrie

$$\frac{C(x, 0, 0, t)}{C_0} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{x - vt}{2(\alpha_x vt)^{\frac{1}{2}}} \right] \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{Y}{4(\alpha_y x)^{\frac{1}{2}}} \right] \operatorname{erf} \left[\frac{Z}{2(\alpha_z x)^{\frac{1}{2}}} \right] \right\}$$

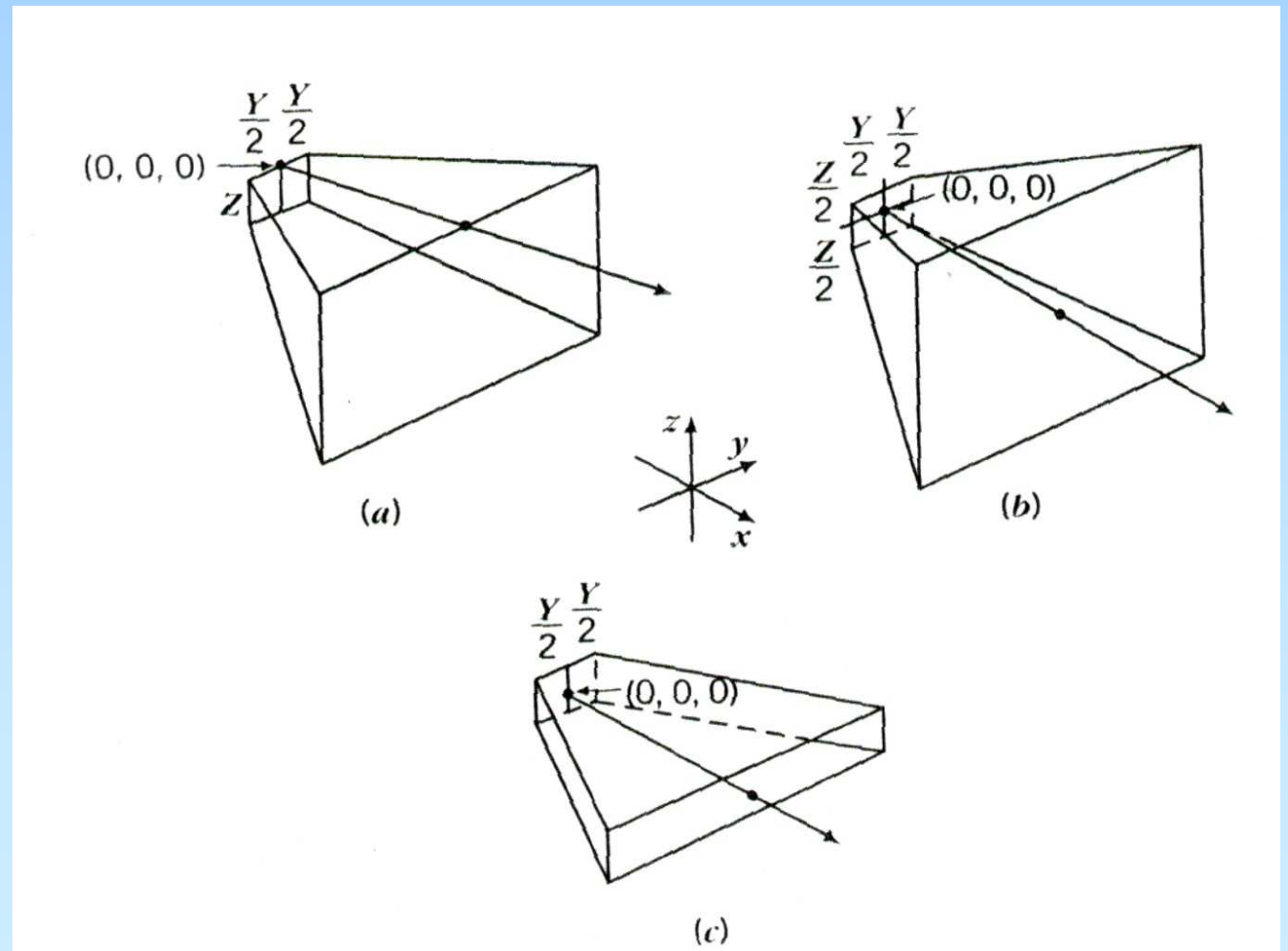
obecná úplná rovnice analytického řešení ve 3-D systému a plošném zdroji

- úprava rovnice podle geometrie zdroje a možnosti šíření kontaminantu

- úplný tvar – šíření ve směru z jen jedním směrem,
ve směru osy y oběma směry

- šíření v obou směrech y a z

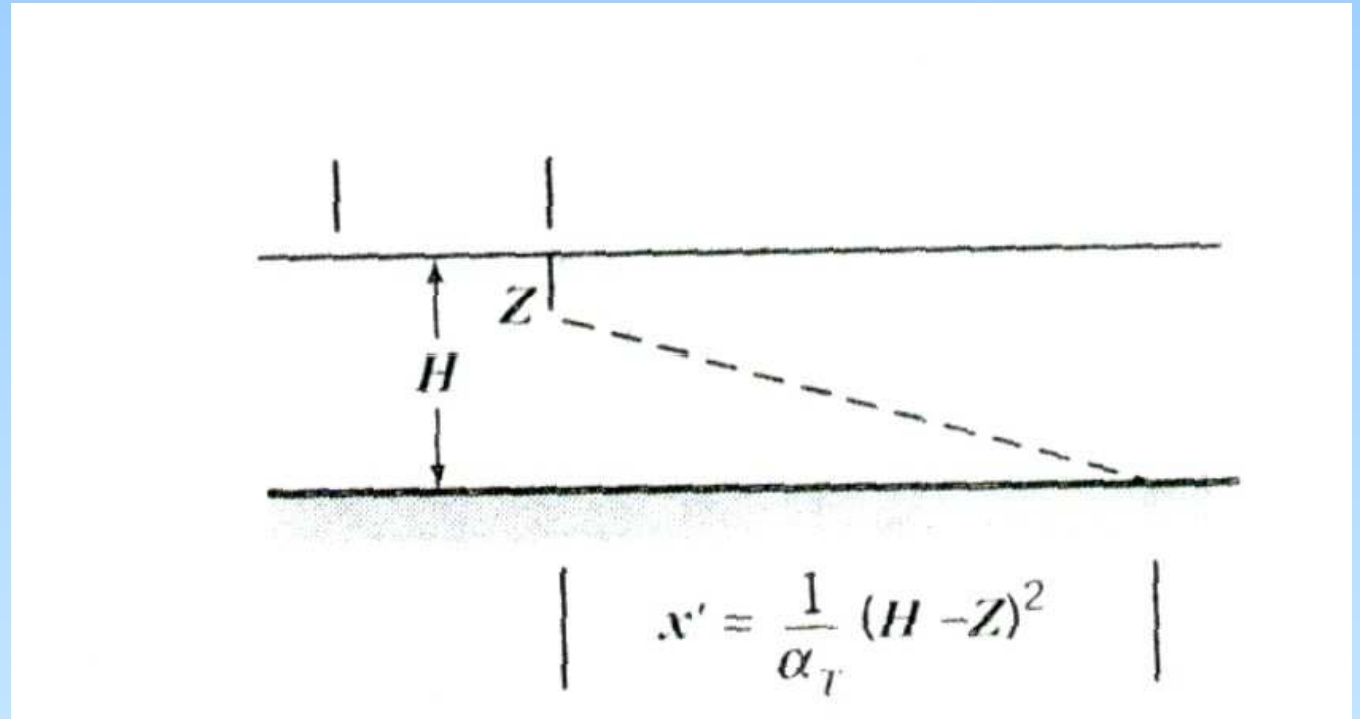
- šíření pouze v obou směrech y
– odpadá člen pro Z



malé mocnosti zvodněných kolektorů

- po určité vzdálenosti vyplní kontaminační mrak zvoďeň v celém profilu Z
- zanedbání dalšího významu příčné disperzivity ve směru Z na šíření kontaminantu

$$x' = \frac{(H - Z)^2}{\alpha_z}$$



- pokud vzdálenost x ve vzorci přesáhne x' , ve vzorci použijeme hodnotu x'

Zavedení koeficientu retardace do rovnic

- hodnotu rychlosti advekce v nahrazuje hodnota rychlosti pohybu retardovaného kontaminantu

