

Obsah

1. ÚVOD	1
2. CHARAKTERISTIKA MODELOVANÝCH SYSTÉMŮ	2
2.1. VYMEZENÍ A DEFINICE ZÁKLADNÍCH POJMŮ	2
2.1.1. <i>Matematický model a způsoby jeho získání</i>	2
2.1.2. <i>Systém a jeho prvky</i>	3
2.1.3. <i>Modelování, verifikace, kalibrace, validace a simulace</i>	4
2.2. OBJEKTY (SYSTÉMY) ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ	5
2.2.1. <i>Klasifikace objektů</i>	5
2.2.2. <i>Vybrané objekty (systémy)</i>	6
3. ZÁKONITOSTI A MODELOVÁNÍ PROCESŮ ŠÍŘENÍ KONTAMINANTŮ V PORÉZNÍCH VRSTVÁCH PŮD, SEDIMENTŮ, APOD.	9
3.1. ZÁKLADNÍ POPIS PROCESU MIGRACE	9
3.2. POPIS (MODELOVÁNÍ) ROVNOVÁŽNÝCH STAVŮ INTERAKČNÍCH DĚJŮ	11
3.2.1. <i>Obecné aspekty popisu rovnovážných dějů</i>	11
3.2.2. <i>Jednosložkové rovnovážné modely</i>	13
3.2.3. <i>Vícesložkové systémy: aditivní rovnovážné modely</i>	17
3.2.4. <i>Vícesložkové systémy: interakční rovnovážné modely</i>	18
3.2.4.1. <i>Vícesložkový Langmuirův model</i>	18
3.2.4.2. <i>Vícesložkové chemicko - rovnovážné modely</i>	19
3.2.4.2.2. <i>Model soustavy substitučních (iontově-výměnných) reakcí</i>	20
3.2.4.2.3. <i>Model soustavy adičních reakcí</i>	22
3.2.4.2.4. <i>Model soustavy monomolekulárních reakcí</i>	23
3.2.4.2.5. <i>Závěr</i>	24
3.2.5. <i>Vícesložkové systémy: povrchově - komplexační modely</i>	25
3.2.5.1. <i>Obecné aspekty povrchově-komplexačních modelů</i>	25
3.2.5.2. <i>Dvouvrstvé povrchově-komplexační modely</i>	27
3.2.5.3. <i>Trojvrstvé povrchově-komplexační modely</i>	27
3.2.5.4. <i>Problematika aplikace povrchově-komplexačních modelů</i>	29
3.2.6. <i>Koncentrační veličiny: způsoby jejich vyjadřování a aplikace</i>	30
3.2.6.1. <i>Problematika koncentračních veličin</i>	30
3.2.6.2. <i>Způsoby výpočtů a aplikace aktivitních koeficientů</i>	31
3.2.7. <i>Vliv tvaru rovnovážné izotermy na proces migrace</i>	33
3.3. KINETIKA INTERAKČNÍCH DĚJŮ	36
3.3.1. <i>Obecné aspekty popisu kinetiky interakčních dějů</i>	36
3.3.2. <i>Jednosložkové kinetické modely</i>	37
3.3.3. <i>Vícesložkové kinetické modely</i>	42
3.3.4. <i>Kinetika rozpadu/vzniku radioaktivních nuklidů</i>	43

3.3.5. Vliv kinetiky na migrační proces.....	43
3.4. ZÁKONITOSTI DISPERZNÍCH DĚJŮ.....	44
3.4.1. Obecný popis disperze.....	44
3.4.2. Obecné tvary distribučních funkcí.....	45
3.4.3. Modely disperzního děje.....	47
3.4.3.1. Modely distribuční $F(t)$ - funkce.....	47
3.4.3.2. Modely distribuční $E(t)$ - funkce.....	49
3.4.3.3. Ostatní typy modelů distribučních funkcí $F(t)$ a $E(t)$	53
3.4.4. Parametrické závislosti disperzního koeficientu.....	55
3.4.5. Vliv disperze na migrační proces.....	58
3.5. ZÁKONITOSTI POHYBU PODZEMNÍ VODY PORÉZNÍM PROSTŘEDÍM.....	60
3.5.1. Obecné aspekty procesu pohybu podzemní vody.....	60
3.5.2. Rozdělení vody ve vertikálním profilu a klasifikace zvodní.....	60
3.5.3. Pohyb vody nasycenou vrstvou zeminy.....	62
3.5.3.1. Obecné zákonitosti pohybu podzemní vody - Darcyho zákon.....	62
3.5.3.2. Parametry Darcyho rovnice.....	65
3.5.3.3. Zobecnění Darcyho zákona.....	67
3.5.4. Pohyb vody nenasyčenou vrstvou zeminy.....	69
3.5.4.1. Darcyho - Buckinghamova rovnice.....	69
3.5.4.2. Richardsovy rovnice.....	69
3.5.5. Vliv pohybu podzemní vody na proces migrace.....	70
3.6. POHYB PODZEMNÍ VODY A MIGRACE KONTAMINANTŮ VE ŠTĚRBINÁCH A PUKLINÁCH HORNIN.....	71
3.6.1. Charakteristika horninového objektu a základní typy modelů.....	71
3.6.2. Model kontinuálního porézního prostředí.....	72
3.6.3. Matricový model.....	73
3.6.4. Závěry.....	74
4. ŠÍŘENÍ KONTAMINANTŮ VE VODNÍCH TOCÍCH A NÁDRŽÍCH.....	75
4.1. POPIS PROCESŮ ŠÍŘENÍ KONTAMINANTŮ A CÍLŮ MODELOVÁNÍ.....	75
4.2. MODEL Y PROCESŮ ŠÍŘENÍ KONTAMINANTŮ VE VODNÍCH TOCÍCH A NÁDRŽÍCH.....	76
4.2.1. Typy matematických modelů.....	76
4.2.2. Difúzně - konvektivní modely.....	79
4.2.2.1. 3 D - model.....	79
4.2.2.2. VERTOX : vertikálně - podélný 2 D - model (z - x model).....	80
4.2.3. Model kaskády průtočných míchaných reaktorů.....	82
4.3. ZÁVĚRY.....	84
5. ŠÍŘENÍ KONTAMINANTŮ V ATMOSFÉRE.....	85
5.1. MEZNÍ VRSTVA ATMOSFÉRY A ZDROJE ZNEČIŠTĚNÍ OVZDUŠÍ.....	85
5.2. ZÁKLADNÍ TYPY MATEMATICKÝCH MODELŮ.....	86
5.2.1. Přehled typů modelů a cílů modelování.....	86
5.2.2. Gaussův (Suttonův) model.....	89
5.2.3. Langrangeův model.....	91

5.2.4. Eulerův model.....	91
5.3. ZÁVĚRY	92
6. PŘEHLED SPECIAČNÍCH PROGRAMŮ A DISKUSE JEJICH VYUŽITELNOSTI	93
6.1. ZÁKLADNÍ PRINCIPY A OBECNÁ STRUKTURA SPECIAČNÍCH PROGRAMŮ.....	93
6.2. POUŽITÍ SPECIAČNÍCH PROGRAMŮ V OBLASTI STUDIA A MODELOVÁNÍ MIGRACE KONTAMINANTŮ	95
6.2.1. <i>Nejpoužívanější speciální programy</i>	95
6.2.2. <i>Problematika datovýchází pro speciální programy</i>	96
6.2.3. <i>Principy využitelnosti speciálních programů při modelování migračních procesů</i>	96
6.3. POROVNÁNÍ DOSTUPNÝCH SPECIAČNÍCH PROGRAMŮ	97
6.3.1. <i>MINTEQA2</i>	97
6.3.2. <i>PHREEQE a HARPHRO</i>	98
6.3.3. <i>MINEQL</i>	98
6.4. ZÁVĚR.....	99
7. PRINCIPY EXPERIMENTÁLNÍCH POSTUPŮ STANOVENÍ ZÁKLADNÍCH PARAMETRŮ MIGRAČNÍCH PROCESŮ.....	99
7.1. ÚVOD.....	99
7.2. METODY STUDIA INTERAKČNÍCH DĚJŮ	100
7.2.1. <i>Předúprava fází a jejich charakterizace</i>	100
7.2.1.1. Odběr a předúprava fází.....	100
7.2.1.2. Charakterizace vzorků.....	101
7.2.2. <i>Experimentální metody</i>	102
7.2.2.1. Úvodní experimenty.....	102
7.2.2.2. Metody založené na použití míchaného reaktoru	103
7.2.2.3. Metody založené na použití diferenciálního reaktoru.....	104
7.2.2.4. Metody založené na použití kolonky s pevnou vrstvou sorbentu.....	105
7.3. METODY STUDIA DISPERZNÍCH A DIFÚZNÍCH DĚJŮ.....	106
7.3.1. <i>Studium disperzních dějů</i>	106
7.3.2. <i>Studium difúzních dějů</i>	106
7.4. METODY STUDIA HYDRODYNAMICKÝCH DĚJŮ	107
7.5. METODY ZJIŠŤOVÁNÍ ZÁKLADNÍCH PARAMETRŮ MEZNÍ VRSTVY ATMOSFÉRY.....	109
7.5.1. <i>Vybrané fyzikální parametry mezní vrstvy atmosféry</i>	109
7.5.2. <i>Metody zjišťování nečistot v ovzduší</i>	110
DOSLOV	112
LITERATURA	113
OBSAH.....	118