



KVALIFIKACIJSKI DOKTORSKI ISPIT
SPREGNUTI MATEMATIČKI MODELI TEČENJA I PRONOSA U
POVRŠINSKIM I PODZEMNIM VODAMA

Krste Živković

Split, srpanj, 2022.

SADRŽAJ

1. Uvod
2. Podzemne vode
3. Površinsko otjecanje
4. Površinski tokovi u rijekama i kanalima
5. Pronos u površinskim i podzemnim vodama
6. Koncepti spregnutog djelovanja površinskih i podzemnih voda
7. Modeliranje tečenja i pronosa u površinskim i podzemnim vodama
 - 7.1. Konvencionalne metode modeliranja
 - 7.2. Koncepti spregnutih integriranih modela
8. Literatura

1. Uvod

O važnosti vode kao životno važnog resursa bespredmetno je raspravljati. Uslijed povećanja stanovništva, razvoja tehnologije i klimatskih promjena ovaj resurs postaje sve više neophodan i ugrožen. Da bi održali suvremeni način života potreba za vodom postaje sve veća te stoga proučavanje prirodnih tokova vode postaje sve više prioritetno.

Proces kretanja vode u atmosferi je kružan. Voda se isparavanjem s mora, jezera, rijeka i površine zemlje izdiže u atmosferu gdje se kondenzira u neki oblik oborine kojim se vraća na zemljinu površinu. Jedan dio oborina odmah ispari, dio se pretvori u led, dio pada direktno na površinu mora ili rijeka, dok dio površinskim otjecanjem završi u more ili rijeke gdje otjecanjem rijeka opet završi u moru, a preostali dio padne na zemljinu površinu gdje infiltracijom dolazi u podzemlje te procjeđivanjem kroz međuzrnatu poroznost laminarnim strujanjem ili kroz vertikalne i horizontalne kanale turbulentnim strujanjem dolazi u dublje slojeve akvifera. U oba slučaja prihranjivaju se podzemni tokovi koji su u međudjelovanju s površinskim vodama, bilo s rijekama, jezerima ili direktno s morem.

Određivanje navedenih procesa tečenja zasebno vrlo je zahtjevno te praktički, osim u pojednostavljenim slučajevima, nemoguće odrediti analitičkim metodama. Alat koji koristimo da bi odredili takve složene pojave je numeričko modeliranje. Numeričko modeliranje sastoji se u tome da se domena u kojoj se promatra tečenje diskretizira na manje dijelove te se na njima postavi matematički model tečenja ili pronosa, najčešće u obliku diferencijalne jednadžbe određenog tipa. Na taj način uspostavljamo lokalnu matricu sustava jednadžbi za svaki element iz kojih se sastavlja globalna matrica sustava za cijelu domenu. Uvrštavanjem rubnih uvjeta, koji zamjenjuju odbačeni dio domene, u globalni sustav jednadžbi dobivamo jedinstveno rješenje tečenja određivanjem piezometarske visine i polja brzina ili pronosa određivanjem polja koncentracije ili vremena putovanja. Konvencionalnim pristupom modeliranja, domene podzemnih i površinskih voda promatraju se zasebno, a utjecaj jedne na drugu zadaju se kroz rubne uvjete i vanjska opterećenja. Na ovaj način sama interakcija podzemnih i površinskih voda ne uzima se u obzir ili se prikazuje u dosta pojednostavljenom obliku. Postoje mnogi slučajevi kada se ova interakcija ne može zanemariti te se ispravne analize mogu raditi samo ako se uzmu u obzir spregnuti integrirani modeli površinskih i podzemnih voda.

Razvoj kompjuterske tehnike, programskih rješenja i numeričkih metoda omogućio je izradu integriranih modela koji su u mogućnosti simulirati spregnuta djelovanja površinskih i podzemnih voda na razini malih slivova do cijelih riječnih bazena i regionalnih modela [Maxwell i dr., 2016, Kollet i Maxwell, 2005, Gunduz i Aral, 2016].

Ovakvi modeli uspijevaju simultano modelirati dvije ili više vodnih domena različitih dimenzionalnosti (3D podzemne vode, 2D površinske vode oborinskog otjecanja i 1D površinske vode rijeka i/ili kanala), različite tipove tečenja (laminarni tokovi podzemlja, laminarni, turbulentni i/ili prijelazni režimi u površinskim vodama) te različite vremenske skale. Uobičajeno, većina današnjih spregnutih modela koristi matematički model u obliku Richardsove jednadžbe za tokove podzemnih voda, a za površinske tokove oborinskog otjecanja, rijeka i kanala se upotrebljava Saint- Venantova jednadžba. Saint- Venantove

jednadžbe se koriste u pojednostavljenom obliku najčešće kao difuzne ili kinematičke valne jednadžbe. Ono po čemu se međusobno razlikuju različiti modeli su: oblik matematičkih modela, dimenzionalnost domena te numerički pristup modeliranju. Generalna klasifikacija današnjih modela može se podijeliti prema strategija sprežanja između vodnih domena te prema formulacijama koje se koriste kod sprežanja [Maxwell i dr. 2016, Gunduz O. i Aral 2016, Huang i Yeh 2009]. Primjeri takvih modela su Parflow, MIKE-SHE, CHATY, WASH123D, PFLOTRAN i dr. U novije vrijeme razvile su se i multifizikalne platforme kao što su COMSOL i MOOSE koje u sebi sadrže sve potrebne korake za modeliranje te izrađivač modela izabire već pripremljene module te ih spaja na njemu pogodan način čime dobiva novi model koji odgovara njegovim inženjerskim ili znanstvenim zahtjevima.

Iako većina današnjih modela imaju različite numeričke, diskretizacijske i spregnute pristupe, oni svi dijele zajednički cilj, da se rigorozno, matematički modelira hidrološki i energetski ciklus kao integrirani spregnuti sustav [Maxwell i dr. 2016].

2. Podzemne vode

Podzemne vode su vode koja se nalaze ispod zemljine površine te ispunjavaju pore, šupljine i pukotine u različitim vrstama tla. Voda u podzemlje uglavnom dolazi infiltracijom oborina i interakcijom s površinskim tokovima. Geološke formacije koje sadrže i kroz koje prolazi podzemna voda nazivaju se vodonosnici. U zavisnosti od geološke građe vodonosnici mogu biti stijene međuzrske poroznosti (prah, glina, pijesak, šljunak) i/ili čvrste stijena s pukotinskom poroznošću. Vodonosnici mogu biti pod tlakom ili sa slobodnim vodnim licem. U vodonosnicima pod tlakom voda saturira cijeli sloj te je od površine ili od akvifera sa slobodnim vodnim licem odvojen nepropusnim slojem. Vodonosnik sa slobodnim vodnim licem se dijeli na zasićeni i nezasićeni dio. Vodno lice prikazuje razinu podzemne vode te dijeli zasićeni od nezasićenog dijela vodonosnika. Nezasićeni dio sastoji se od zone kapilarnog dizanja i zone adhezivne vode. Adhezivna voda je trajno vezana uz čestice tla i nalazi se iznad zone kapilarne vode koja se nalazi neposredno iznad razine podzemne vode. Tečenje u vodonosnicima odvija se sustavom povezanih pora i u vodonosnicima međuzrske poroznosti je to laminarno bezvrtložno tečenje uzrokovano potencijalnim strujanjem uslijed razlike piezometarskih visina. Za razliku od zasićenog dijela vodonosnika gdje gibanje vode određuju razlike u tlakovima vode uslijed gravitacijskih sila u kapilarnoj zoni djeluju adhezivne sile koje stvaraju podtlak te izdižu vodu iznad vodnog lica. U zavisnosti od vrste tla ovo izdizanje može biti od nekoliko centimetara u pijesku ili šljunku, pa do više od metra u glinovitim materijalima. U vodonosnicima čvrstih stijena kao što je krško područje, tečenje je vrlo kompleksno zbog izrazite heterogenosti samog vodonosnika koji se sastoji od čvrste stijene slabe propusnosti, površinskog sloja veće propusnosti te krških kanala u kojima se odvija brzo turbulentno tečenje.

Matematički model toka u podzemlju u saturiranim i djelomično saturiranim uvjetima najčešće se opisuje nekim oblikom Richards – ove jednadžbe tečenja. U literaturi se mogu naći tri oblika jednadžbe, a to su jednadžba bazirana na piezometarskoj visini, jednadžba bazirana na

zasićenosti vode u porama te mješoviti oblik koji koristi oba člana [Celia i dr. 1990, Kirkland i dr. 1992] Jednadžba bazirana na piezometarskoj visini može se koristiti u svim situacijama, ali pokazuje veliku nelinearnost, dok jednadžba bazirana na zasićenosti vode pokazuje manju nelinearnost, ali je primjenjiva samo u nesaturiranoj zoni. Da se umanje nedostaci oba oblika uveden je mješoviti oblik jednadžbe (1) [Gunduz i Aral 2016].

$$S_s \frac{\theta}{\eta} \frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla \cdot (k_r(\theta) K_s \cdot \nabla H) + q_{Ms} \quad (1)$$

S_s specifična zapremina [L⁻¹], θ zasićenost vode [-], η porozitet [-], H piezometarska visina vode [L], t vrijeme [T], k_r relativna permeabilnost [-], K_s tenzor hidrauličke propusnosti saturiranog tla [LT⁻¹], q_{Ms} - izvor ili ponor [LT⁻¹]

Tečenje u djelomično saturiranim uvjetima ovisi o relativnoj permeabilnosti k_r koja zavisi od stupnja saturiranosti vode i vrsti tla te se često određuje preko van Genuchten - Mualem modela (2) [Szymkiewicz 2013]:

$$k_r(S_e) = S_e^\kappa \left[1 - \left(1 - (S_e)^{1/m_g} \right)^{m_g} \right] \quad (2)$$

S_e efektivna saturiranost [-], m_g index distribucije veličine pora [-], κ koeficijent povezanosti [-]

Efektivna saturiranost u odnosu na piezometarsku visinu dana je izrazom (3) [van Genutchen 1980].

$$S_e = \left[\frac{1}{1 + (\alpha h)^{n_g}} \right]^{m_g} \quad (3)$$

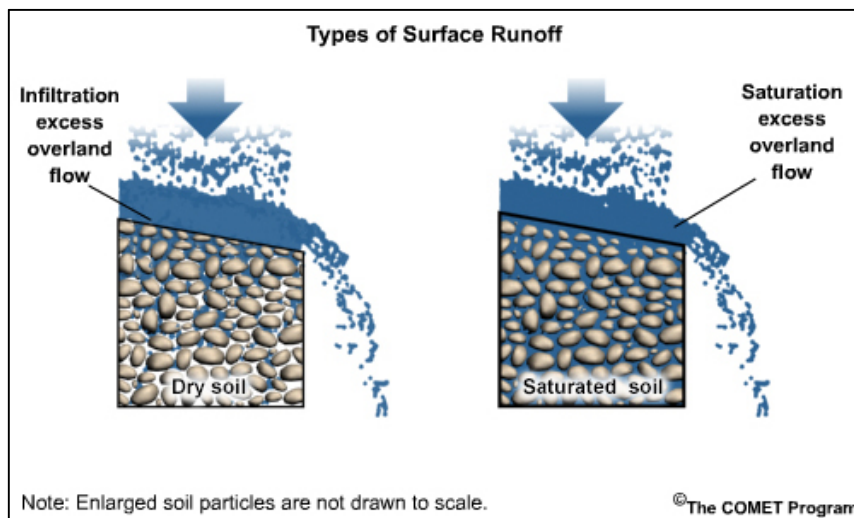
α inverzna vrijednost tlaka pri ulaska zraka u pore [m], n_g index distribucije veličine pora [-]. Efektivna saturiranost u odnosu na sadržaj vode dana je izrazom (4)

$$S_e = \frac{\theta - \theta_{wr}}{1 - \theta_{wr}} \quad (4)$$

θ_{wr} rezidualna zasićenost vode.

3. Površinsko otjecanje

Površinsko otjecanje nastaje uslijed padanja kiše-oborine ili otapanja snijega i leda. Dio vode koji se ne infiltrira u tlo površinski otječe prema recipijentu (odvodni kanali, rijeke, jezera ili more). Količina i vrijeme površinskog otjecanja ovisi o svojstvima tla i trenutnoj zasićenosti tla vodom. Postoje dva tipa površinskog otjecanja, otjecanje uslijed prekomjerne infiltracije i otjecanje uslijed prekomjerne saturacije. Otjecanje uslijed prekomjerne infiltracije nastaje kad tlo ne može infiltrirati svu palu oborinu te dio koji se ne infiltrira u podzemlje stvara površinsko otjecanje. Otjecanje uslijed prekomjerne saturacije nastaje kad je tlo potpuno saturirano te više ne može doći do infiltracije te sva oborina koja padne stvara površinsko otjecanje (slika 1.)



Slika 1. Tipovi površinskog otjecanja.

Površinsko otjecanje uslijed oborina najčešće se opisuje **2D Saint-Venantovim jednadžbama** (5,6,7) koje su izvedene iz zakona održanja mase i zakona održanja količine gibanja s tim da su usvojena određena pojednostavljena zbog relativno male dubine toka [Hromadka i Yen 1987].
Jednadžba kontinuiteta toka je:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial uh}{\partial x} + \frac{\partial vh}{\partial y} = q_r - q_e \quad (5)$$

Jednadžba održanja količine gibanja toka:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2 h}{\partial x} + \frac{\partial uvh}{\partial y} + gh \frac{\partial h}{\partial x} - gh(S_{ox} - S_{fx}) = m_{rx} - m_{ex} \quad (6)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial v^2 h}{\partial y} + \frac{\partial uvh}{\partial x} + gh \frac{\partial h}{\partial y} - gh(S_{oy} - S_{fy}) = m_{ry} - m_{ey} \quad (7)$$

h visina površinskog toka [L], $u; v$ brzine u x i y smjeru [LT^{-1}], t vrijeme [T], S_o nagib površine terena [-], S_f koeficijent trenja [-], q_r ; m_{rx} ; m_{ry} članovi koji predstavljaju vanjsko opterećenje, q_e ; m_{ex} ; m_{ey} članovi koji predstavljaju izmjenu s podzemnim vodama

Pokazalo se u praksi da većinu prirodnih tokova vrlo dobro opisuje difuzno valna jednadžba. Navedenu jednadžbu dobivamo kada u jednadžbi (6) i (7) prva tri inercijska člana zanemarimo te u kombinaciji s jednadžbom (5) i Mannigovim izrazom za brzinu dobijemo difuznu ili neinerzijsku valnu jednadžbu (8) [Maxwell i dr. 2016, Huang i Yeh 2009].

$$\frac{\partial H}{\partial t} - \nabla(K_o \nabla H) = q_r - q_e \quad (8)$$

K_o površinska vodljivost [LT^{-1}]

4. Površinski tokovi u rijekama i kanalima

Rijeka je površinski prirodni tekući vodotok, obično slatkovodna, teče prema oceanu, moru, jezeru ili drugoj rijeci. Prihranjivanje rijeka odvija se u kišnim razdobljima preko površinskog otjecanja kiša i drugih oborina, podzemnim vodama i drugim rijekama, dok u sušnim razdobljima rijeke i potoci najčešće prihranjivaju podzemne vode. Površina, oblik i nagib riječnog korita su nejednoliki i nepravilni te je stoga i tečenje u rijekama nejednoliko i nestacionarno. Kanali su umjetno stvoreni površinski vodotoci. Primjena im je različita, od navodnjavanja do sustava obrana od poplava. Poprečni presjek i nagib kanala najčešće je pravilan i jednolik pa su i tokovi u njima jednoliki. S hidrauličkog stajališta tokove u rijekama i kanalima možemo promatrati kao strujanja u otvorenim kanalima te njihova strujanja možemo podijeliti u nekoliko osnovnih podjela [MacArthur i Devries 1993], stacionarno strujanje koje može biti laminarno, prijelazno ili turbulentno te nestacionarno strujanje koje može biti prijelazno i turbulentno. Otjecanje u rijekama i kanalima razlikuje se u odnosu na površinsko otjecanje u dubini toka i relativno uskim granicama. Iako je dubina veća u odnosu na površinsko otjecanje relativno je mala u odnosu na tok rijeke i često se usvaja pretpostavka da su dubina i prosječna brzina jednoliki cijelim presjekom korita ili kanala. Zbog navedenog mogu se uvesti slična pojednostavljenja kao kod oborinskog otjecanja te se za rijeke i kanale najčešće koristi **1D Saint-Venantove jednadžbe**. Jednadžbe su analogne jednadžbama 5,6,7 i 8 s tim da su prilagođene 1D dimenzionalnosti.

5. Pronos u integriranim spregnutim hidrološkim modelima

Matematički model pronosa određenog zagađenja ili trasera za sve vodne domene opisujemo advektivno - disperzivnom jednadžbom dobivenom iz zakona održanja mase za fazu [de Rooji 2013].

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(cv) - \nabla(D_H \nabla c) = cQ_p + c^*Q_R \quad (9)$$

c koncentracija sekundarne faze [M/L^3], v brzina osnovne faze [LT^{-1}], D_H tenzor hidrodinamičke disperzije [L^2/T], Q_p protok crpljenja [M^3T^{-1}], Q_R protok prihranjivanja [M^3T^{-1}], c^* koncentracija injektirane faze [M/L^3]

$$D_H = D + D_m \quad (10)$$

D - tenzor mehaničke disperzije [L^2T], D_m - tenzor molekularne difuzije [L^2T]

Tečenje u podzemlju se znatno razlikuje od površinskog osim ako se radi o podzemnim kanalima tako se i primjena ADE u podzemnim i površinskim vodama razlikuje u odnosu advektivnog i disperzivnog procesa te određivanju tenzora disperzije. U površinskim vodama tokovi su znatno brži tako da je advekcija dominantan proces te se pokazalo da na transport

zagađenja znatan utjecaj ima longitudinalni tenzor disperzije [Deng i dr. 2001] koji ovisi o geometriji kanala i/ili rijeke i profilu brzina. U podzemlju tokovi su sporiji te vrsta i propusnost tla definira odnos advekcije i disperzije. Isto tako potrebno je definirati skalu na kojoj promatramo transport jer nije moguće promatrati tokove i transport na svim skalama. Tenzori disperzije ovise o skali koju smo izabrali jer mora uključivati gubitak informacija koje smo zanemarili promatrajući proces na skali većoj od mikroskopske.

6. Koncepti spregnutog djelovanja podzemnih i površinskih voda

Interakcije između vodnih tijela različitih domena jedna je od ključnih komponenata pri integralnom spregnutom modeliranju [Kollet i Maxwell 2005]. U trenutku kad voda preko oborina padne na zemlju dolazi do infiltracije gdje voda u zavisnosti od saturiranosti prolazi u dublje dijelova tla i/ili površinski otječe prema recipijentu koji može biti rijeka, kanal, jezero ili more. U zavisnosti od godišnjeg doba, odnosno sušnih i kišnih razdoblja, ta međudjelovanja su različita. Za vrijeme kišnog razdoblja kad su tla više saturirana vodom uslijed oborina doći će do smanjene infiltracije te će veći dio vode površinski otjecati prema recipijentu. Rijeke i kanali će se više prihranjivati ne samo površinskim nego i podzemnim vodama što će utjecati na povećanje specifičnog protoka. Za vrijeme sušnih razdoblja tla su manje saturirana vodom te dolazi do povećane infiltracije oborina a rijeke postupno počinju prihranjivati podzemne tokove te specifični protok rijeka opada što na kraju utječe da manje slatke vode prihranjuje estuarije te klin slane vode sve više prodire u dubinu estuarija.

Da bi uspostavili integrirani spregnuti model tečenja i pronosa, potrebno je sagledati sve međusobne interakcije između navedenih vodnih tijela vodeći računa o njihovoj korištenoj dimenzionalnosti:

- interakcija 2D površinskog otjecanja uslijed oborina i 3D podzemnih voda
- interakcija između 2D površinskog otjecanja i 1D rijeka i/ili kanala
- interakcija 1D rijeka i 3D podzemnih voda

Svaka od navedenih interakcija ima zaseban pristup i formulaciju spregnutog djelovanja.

Kod uspostavljanje interakcije tečenja između navedena tri vodna tijela u literaturi se spominju tri najčešća pristupa [Maxwell i dr. 2016]:

a) preko **fluksa izmjene** [VanderKwaak 1999]

$$q_e(x) = \lambda(x)(h^o - h^s) \quad (11)$$

$q_e(x)$ - fluks toka između različitih vodnih domena

$\lambda(x)$ - koeficijent izmjene

h^o - piezometarska visina površinske vode

h^s - piezometarska visina podzemne vode

Kod ovog pristupa pretpostavlja se da postoji tanki sloj („buffer zone“) između dviju domena određene provodljivosti koja se izražava preko linearnog koeficijenta izmjene koji je nazivno omjer hidraulične propusnosti i debljine tankog sloja između dviju domena. Ovaj koeficijent nije moguće mjeriti već se najčešće kalibrira s postojećim mjernim podacima.

b) preko **kontinuiteta tlaka i fluksa** [Kollet i Maxwell 2005]

$$\begin{aligned} h^o &= h^s \\ q^o &= q^s \end{aligned} \quad (12)$$

$h^o q^o$ – visina površinskog toka i fluks izmjene površinskog toka

$h^s q^s$ - piezometarska visina podzemne vode i fluks izmjene podzemnih voda

c) preko **promjenjivih rubnih uvjeta** [Camporese i dr 2010]

Kod ovog pristupa iterativnim putem određuju se rubni uvjeti. U prvom koraku se zada intenzitet oborina te se u algoritmu za podzemni tok odredi da li se količina padalina potpuno infiltrira u podzemlje. U slučaju potpune infiltracije, rubni uvjeti npr. u podzemlju su Neumanovi, u slučaju da se dio oborine ne infiltrira rubni uvjeti se prebacuju u Dirichletove te se fluks izmjene izračunava preko visine površinskog toka.

Radi ilustracije na slici 2 je prikazana interakcija rijeka i podzemnih voda te sprezanje ovisi da li postoji tanki sloj između dna kanala i podzemlja ili ne. Ako postoji, sprezanje se izračunava preko fluksa izmjene, a ako nema međusloja pretpostavlja se kontinuitet tlaka i fluksa [Yeh i dr., 2003].

Kod promatranja pronosa u spregnutom djelovanju površinskih i podzemnih tokova, fluks izmjene definiramo izrazom:

$$J_{ex} = q_{ex} c_{exf} \quad (13)$$

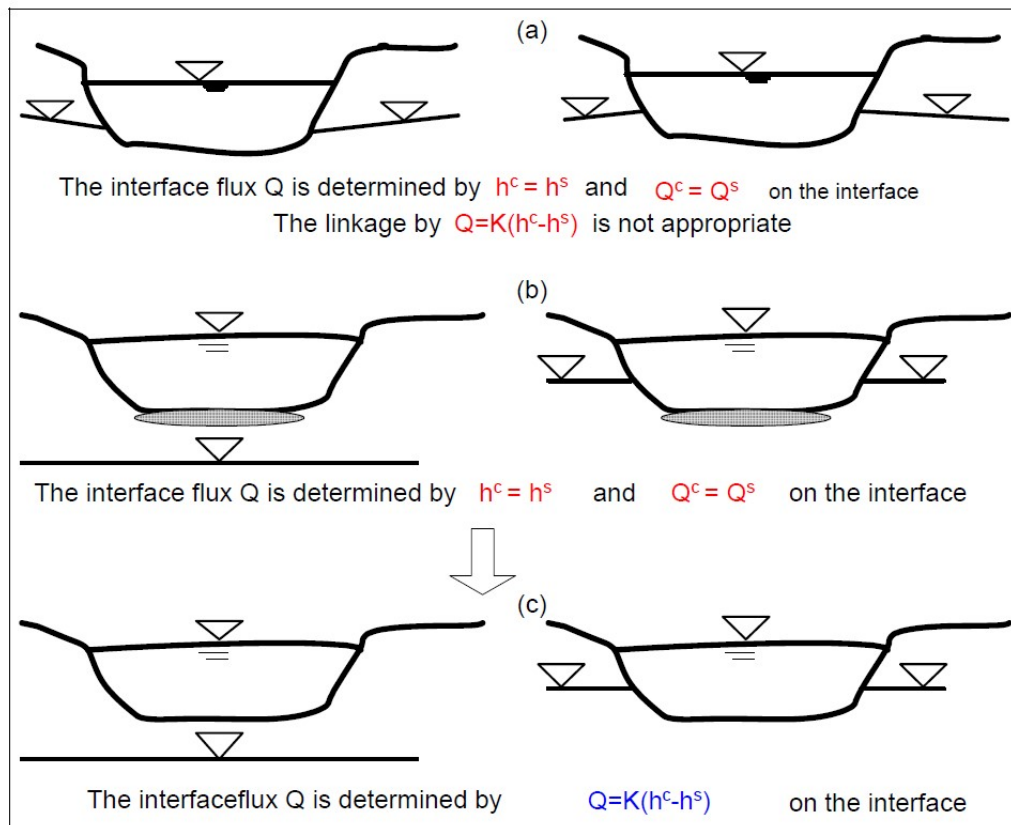
J_{ex} - fluks zagađenja ili trasera između domena površinskih i podzemnih voda

q_{ex} - fluks toka između domena površinskih i podzemnih voda

$c_{exf} = \begin{cases} c_s \\ c_p \end{cases}$ - koncentracija zagađenja ili trasera zavisno o smjeru tečenja između dviju vodnih domena

c_s - koncentracija zagađenja površinske vode

c_p - koncentracija zagađenja podzemne vode



Slika 2. Shematski prikaz interakcije podzemnih voda i površinskih tokova kanala ili rijeka; a) i b) preko kontinuiteta tlaka i fluksa; c) preko fluksa izmjene.

7. Modeliranje toka i pronosa u površinskim i podzemnim vodama

7.1. Konvencionalne metode numeričkog modeliranja

Zbog kompleksnosti gibanja vodnih tijela u svim domenama rješenje realnih primjera analitičkim putem nije moguće te je potrebna primjena približnih numeričkih rješenja. Konvencionalnim metodama numeričkog modeliranja domene pojedinog vodnog tijela promatraju se zasebno, a utjecaji iz domena drugih vodnih tijela zadaju se preko rubnih uvjeta i vanjskog opterećenja.

Ako promotrimo problem tečenja i domenu podzemnih voda u konvencionalnom pristupu ona je ograničena domenama površinskih voda (otjecanje oborina, rijekama i/ili kanalima), podzemnim kanalima te morem i kao takva ima strogo definirane granice između njih. Sada takvu domenu promatramo izolirano te je prostorno diskretiziramo u konačne dijelove (elemente ili volumene zavisno od numeričke metode koju izaberemo) u određenoj dimenzionalnosti s tim da domenu podzemlja najčešće promatramo u 3D. Na svaki dio domene, konačni element ili volumen, postavimo jednadžbu tečenja te tako definiramo matricu tečenja. Ovako definiran problem nema rješenje već moramo zadati rubne uvjete kojim opisujemo djelovanje odbačenih domena. Rubni uvjeti mogu biti prirodni ili prisilni.

Prirodni uvjeti predstavljaju fluks toka kroz granicu, dok prisilni uvjeti predstavljaju poznatu piezometarsku visinu koja mora biti zadana barem u jednoj točki. Ovako postavljen problem s definiranim rubnim uvjetima daje nam rješenje tlaka i brzine na svakom elementu čime smo definirali tečenje podzemne vode.

Analogno ovoj metodologiji rješavamo i druge vodne domene te dobivamo korektna rješenja u svakoj od njih te u praksi za svako od navedenih tečenja imamo posebno razvijena programska rješenja. Ovakav konvencionalni pristup je moguć samo ako vodne domene imaju slabu međuzavisnost. U realnosti kao što je već navedeno spomenute vodne domene su u interakciji te ih je fizikalno neispravno odvojiti (krški vodonosnici, interakcija sustava površinskih i podzemnih voda ili prodiranje slane vode iz mora u obalne akvifere i estuarije) i ako želimo modelirati hidrološki sustav (npr. sliv ili njegov dio) u cjelini konvencionalnim metodama, to na opisani način često nije moguće postići.

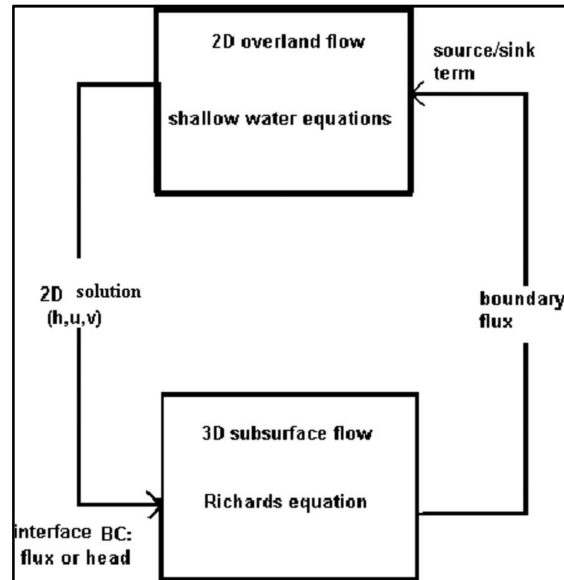
7.2. Koncepti spregnutih integriranih modela

Integralni hidrološki modeli su spregnuti modeli koji uspijevaju simulirati cijeli hidrološki ciklus uključujući sve pripadne površinske i podzemne vode. Takvi modeli uspijevaju simulirati površinsko i podzemno tečenje te prikazati interakcije između različitih vodnih domena. Većina današnjih modela bazira se na rješavanju 3D Richards-ove jednadžbe za podzemlje te 2D i 1D St. Venant-ovih (ili jednostavnije valnih difuznih) jednadžbi za površinske tokove. Pronos se prikazuje poznatom advektivno disperzivnom jednadžbom. Modeli se razlikuju prema vremenskoj i prostornoj diskretizaciji vodnih domena, izboru formulacija osnovnih jednadžbi te „solverima“ za rješavanje linearnih i nelinearnih sustava jednadžbi, no ključna stvar u takvim modelima je način spajanja domena u jedan integralni sustav.

Maxwell i dr. (2014), testirali su sedam poznatih modela integralnog tipa dok su Huang i Yeh, (2009) usporedili načine spreznjanja te su uspostavili klasifikaciju današnjih modela kroz dva parametra (prema tehnici rješavanja i konceptu spreznjanja). Prema tehnici rješavanja postoje tri podjele: asinkrono povezivanje ili sekvencionalni neiterativni pristup; sekvencionalno iterativni pristup te potpuno spregnuto rješavanje ili globalno implicitni pristup. Prema konceptu spreznjanja isto tako postoje tri podjele obrađene u prethodnom poglavlju: preko fluksa izmjena, kontinuiteta tlaka i fluksa te prema promjenjivim rubnim uvjetima.

Ako gledamo asinkrono povezivanje (sekvencionalno neiterativno) proces započinje izračunom površinskih voda s tim da mu se zada intenzitet oborina i fluks izmjene sa podzemljem kao vanjsko opterećenje izračunato iz prethodnog (u prvom vremenskom koraku početnog) koraka. Nakon izračuna parametara površinskih voda dobivena visina površinskog toka se zadaje kao rubni uvjet za izračun podzemnog toka. Proračun podzemnog toka s novim rubnim uvjetima na granici izračunava piezometarsku visinu i polje brzina podzemnih voda te flukseve izmjene potrebne za novi korak iteracije. Razlika između iterativnog od neiterativnog postupka je u tome što kod iterativnog postupka prije svakog sljedećeg koraka fluks izmjene prolazi postupak ponavljanja iteracije do određene konvergencije prema unaprijed zadanom kriteriju. Fluksevi izmjene određuju se prema jednom od koncepata spreznjanja odnosno formulacijama (11) ili

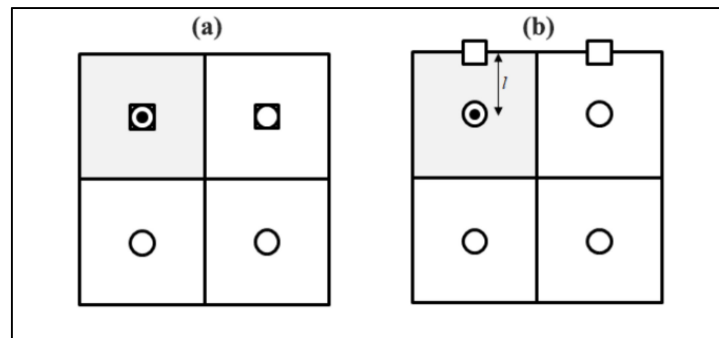
(12). Na slici 3. prikazana je shema iterativne petlje sprežanja podzemnih i oborinskih površinskih voda. Izračun parametara površinskih voda može imati više vremenskih podkoraka od podzemlja zbog same prirode otjecanja i bržeg odvijanja procesa.



Slika 3: Shema iterativne petlje sprežanja između podzemnih i oborinskih površinskih voda [Huang i Yeh 2009].

Programski modeli PAWS [Shen i Phanikumar, 2010; Shen i dr.,2013], MIKE – SHE [Abbott i dr., 1986a & b] i tRIBS [Ivanov i dr., 2004] su bazirani na asinkronom pristupu dok su npr. GSFLOW[USGS 2021] i OpenGeoSys [Delfs i dr., 2009, 2012] bazirani na iterativnom pristupu. Kod globalno implicitnog postupka jednadžbe podzemnog i površinskog toka te fluksevi izmjene rješavaju se kroz jedan globalni sustav nelinearnih jednadžbi [Maxwell i dr. 2014],[Huang i Yeh 2009]. Parflow [Ashby and Falgout, 1996; Kollet and Maxwell, 2006] , WAH123D [Yeh 2009], HydroGeosphere [Aquanty Inc., 2013] su primjeri poznatih programskih rješenja bazirani na ovom pristupu iako treba napomenuti da u novijim verzijama neki programi imaju opciju izbora tehnike rješavanja. U literaturi nema jedinstvenog stava koja formulacija, odnosno koji koncept sprežanja je fizikalno ispravniji. Kollet i Maxwell, 2005, te Huan i Yeh, 2009, u svojim radovima objašnjavaju da je kontinuitet tlaka i fluksa fizikalno ispravan način dok sprežanje preko fluksa izmjene je ispravno jedino u slučaju ako postoji međusloj između površinskih i podzemnih voda te ako se znaju karakteristike tog sloja, no u protivnom ovakav način podložan je kalibraciji. de Rooij, 2017, kroz pojmove dvostrukog čvora i zajedničkog čvora tvrdi da je fluks izmjene fizikalno ispravniji način jer uzima u obzir prirodnu naboranost tla. Termini dvostruki i zajednički čvor odnose se na čvorove diskretizacijske mreže gdje kod zajedničkog čvora površinske i podzemne vode dijele zajednički čvor (slika 4a) dok kod dvostrukog čvora površinska i podzemna domena imaju različite čvorove (slika 4b). Ako primjenjujemo metodu dvostrukog čvora onda razlika između njih (l) fizikalno predstavlja dubinu površinskog nabora te je u

formulaciji (11) izražena kroz koeficijent $\lambda = K/l$ gdje je K koeficijent propusnosti površinskog sloja debljine l.



Slika 4: a) zajednički čvor i b) dvostruki čvor [de Rooij, 2017]

Kod primjene zajedničkog čvora koncept kontinuiteta tlaka i protoka je više opravdan jer jedan čvor predstavlja zajedničku točku površinskih i podzemnih voda čime se osigurava kontinuitet tlaka. Iako ovaj pristup ima dosta prednosti izgleda da su njegove primjene ograničene na djelomično saturirane uvjete [Gunduz i Aral, 2016]. Maxwell i dr., 2014, usporedbu modela zaključuju tim da testirani modeli pokazuju slična ponašanja pri jednakim uvjetima, ali isto tako napominju da ne postoji jedinstveni fizikalni testni model kojim se može testirati točnost numeričkih modela.

Pronos u svim domenama opisuje se poznatom ADE jednadžbom (9). Metode za rješavanje ADE jednadžbe su različite te se mogu klasificirati kao Eulerove, Lagrangeove te hibridne Euler-Lagrangeove metode. Eulerove metode su konvencionalne metode konačnih elemenata i volumena, te se kod pronosa rijetko koriste zbog numeričke nestabilnosti koju izaziva advektivna komponenta. Parametar koji određuje numeričku stabilnost jest grid Pecletov broj a predstavlja odnos advекcije i disperzije. Kako je advektivni dio pronosa često dominantan, Pecletov broj postaje prevelik te dolazi do numeričkih nestabilnosti i nefizikalnih rezultata.

Lagrangeove metode („particle tracking“) odvojeno rješavaju advektivni i disperzivni dio ADE jednadžbe. Ove metode koriste polje brzina dobivenih iz jednadžbi tečenja metodama konačnih elemenata ili volumena te problem pronosa svode na praćenje čestica zagađenja ili trasera po strujnicama. Prednosti ovih metoda su što ne ovise o Pecletovom broju, dok je mana posredno određivanje koncentracije zagađenja ili trasera što opet može uzrokovati numeričke oscilacije. Hibridne metode koriste prednosti obiju metoda te za advektivni dio koriste Lagrangeove metode, a disperzivni dio jednadžbe rješavaju Eulerovim metodama.

Pronos zagađenja u samim interakcijama površinskih i podzemnih voda u većini današnjih modela definiran je pretpostavkom da je advektivni dio pronosa dominantan te se prvo iz jednadžbi tečenja odredi fluks izmjene i njegov smjer. Temeljem toga odredi se fluks pronosa prema jednadžbi (14) s tim da smjer definira fluks izmjene. Putti i Paniconi, 2015, napominju da pronos u interakcijama površinskih i podzemnih voda nije dovoljno istražen te da su procesi povezani djelovanjem evapotranspiracije, infiltracije i upijanjem korijenja što dodatno komplicira istraživanje pronosa u integriranim modelima.

Razvoj integralnih spregnutih hidroloških modela nije moguć bez razvoja računalne tehnologije. U hardverskom smislu to predstavlja razvoj procesora velikih brzina obrade podataka te

memorijskih jedinica za velike kapacitete pohrane. Umrežavanje računala u klastere omogućilo je mnogo bolje performanse i dostupnost više poslužitelja koji mogu biti na suprotnim stranama svijeta. U programskom smislu razvijena su rješenja za paralelno programiranje kao što je MPI (Message Passing Interface) koji omogućuju rješavanje problema do milijardu stupnjeva slobode. Ovakav razvoj računalne tehnike doveo je do razvoja već spomenutih integralnih modela kao što su PFLOTRAN[Hamond G.E. i dr.2019], WASH123D, HydroGeoSphere i drugi, ali isto tako u praksi su se razvile multifizikalne platforme kao što su COMSOL, FEniCS ili MOOSE. Zajednička komponenta platformi jest da obuhvaćaju sve korake u tijeku modeliranja - od definiranja geometrije, diskretizacije, rubnih i početnih uvjeta, opterećenja, svojstava materijala preko rješavanja problema i naknadne obrade rezultata.

Tako na primjer MOOSE-Multiphysics Object-Oriented Simulation Environment, [Gaston i dr., 2009] je platforma koja se bazira na C++ objektno orijentiranom programiranju koristeći metodu konačnih elemenata i biblioteku PETSc (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation), koja na objektni način promatra matrice i vektore te nudi efikasne solvere za rješavanje linearnih i nelinearnih jednadžbi. MOOSE sadrži već pripremljene fizikalne module iz raznih područja primijenjene fizike (mehanika fluida, čvrstog i deformabilnog tijela, termodinamika,...) i metodologiju rješavanja istih te je na korisniku da izabere module koji odgovaraju njegovom istraživanju te ih spregne na njemu odgovarajući pristup i na taj način odbije jedinstvenu aplikaciju prilagođenu točno određenoj problematici.

8. Literatura

Balay S, Gropp WD, McInnes LC, et al. (1997) Efficient management of parallelism in object oriented numerical software libraries. In: Arge E, Bruaset AM and Langtangen HP (eds) Modern Software Tools in Scientific Computing. Basel: Birkhäuser, pp. 163–202.

Brooks, R. H. and A. T. Corey, Hydraulic properties of porous media, *Hydrology Paper No. 3*, Civil Engineering Department, Colorado State University, Fort Collins, CO, 1964.

Celia, M. A., E. T. Bouloutas, and R. L. Zarba, "A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation," *Water Resources Research*, 26 (7): 1483–1496, 1990.

Camporese, M., C. Paniconi, M. Putti, and S. Orlandini (2010), Surface-subsurface flow modeling with path-based runoff routing, boundary condition-based coupling, and assimilation of multisource observation data, *Water Resour. Res.*, 46, W02512, doi:10.1029/2008WR007536.

Deng ZQ, Singh VP, Bengtsson L [Longitudinal dispersion coefficient in straight rivers](#)
Journal of hydraulic engineering 127 (11), 919-927

de Rooij, R., Graham, W., and Maxwell, R. M.,(2013). A particletracking scheme for simulating pathlines in coupled surface-subsurface flows, *Adv. Water Resour.*, 52, 7–18, <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2012.07.022>.

de Rooij, R., (2017) New insights into the differences between the dual node approach and the common node approach for coupling surface–subsurface flow, *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 21, 5709–5724, 2017, - <https://doi.org/10.5194/hess-21-5709-2017>

Gaston D, Hansen G, Kadioglu S, et al. (2009a) Parallel multiphysics algorithms and software for computational nuclear engineering. *Journal of Physics: Conference Series* 180(1): 012012. DOI 10.1088/1742-6596/180/1/012012

Gaston D, Newman C and Hansen G (2009b) MOOSE: a parallel computational framework for coupled systems of nonlinear equations. In: American Nuclear Society 2009 international conference on advances in mathematics, computational methods, and reactor physics, Saratoga Springs, NY.

Gunduz, O. and M. M. Aral (2016) *Handbook of Applied Hydrology* (pp.54.1-54.14); 2nd edition; Publisher: Mc Graw Hill Inc

Hromadka, T.V., Yen, Chung-Cheng - A diffusion hydrodynamic model - 1987, DO - 0.3133/wri874137

DB - USGS Publications Warehouse, - <http://pubs.er.usgs.gov/publication/wri874137>

Huang, Guobiao and Yeh, Gour-Tsyh 2009 „Comparative Study of Coupling Approaches for Surface Water and Subsurface Interactions“ - *Journal of Hydrologic Engineering*

Kirkland M. R., R. G. Hills, and P. J. Wierenga, “Algorithms for solving Richards’ equation for variably saturated soils,” *Water Resources Research*, 28 (8): 2049–2058, 1992.

Kollet, S J, and Maxwell, R M. 2005. "Integrated Surface-groundwater Flow Modeling: a Free-surface Overland Flow Boundary Condition in a Parallel Groundwater Flow Model". United States. <https://www.osti.gov/servlets/purl/887270>.

Malenica L.: Numeričko modeliranje bazirano na spline baznim funkcijama: Primjena na modeliranju tečenja u krškim vodonosnicima i advektivno dominantnim problemima, disertacija, Sveučilište u Splitu, Fakultet građevinarstva, arhitekture i geodezije, Split 2019

Malenica, L.; Gotovac, H.; Kamber, G.; Simunovic, S.; Allu, S.; Divic, V. Groundwater Flow Modeling in Karst Aquifers: Coupling 3D Matrix and 1D Conduit Flow via Control Volume Isogeometric Analysis—Experimental Verification with a 3D Physical Model. *Water* **2018**, *10*, 1787. <https://doi.org/10.3390/w10121787>

MacArtur,R., and DeVries J.J. 1993. *Introducion an Application of Kinematic Wave Routing, Techniques Using Hec-1*, US Army Corps of Engineers, Institute for Waters Resurces, Hydrologic Engineering Center (HEC)

Maxwell, R. M., et al. (2014), Surface-subsurface model intercomparison: A first set of benchmark results to diagnose integrated hydrology and feedbacks, *Water Resour. Res.*, 50, 1531–1549:10.1002/2013WR013725.

Paniconi, C., and M. Putti (2015), Physically based modeling in catchment hydrology at 50: Survey and outlook, *Water Resour. Res.*, 51, 7090–7129, doi:10.1002/2015WR017780.

Szymkiewicz, A. (2013). *Mathematical Models of Flow in Porous Media In: Modelling Water Flow in Unsaturated Porous Media. GeoPlanet: Earth and Planetary Sciences.* Springer, Berlin, Heidelberg.

U.S. Environmental Protection Agency.: *Estimation of Infiltration Rate in the Vadose Zone: Application of Selected Mathematical Models Volume II, (EPA/600/R-97/128b) February 1998*

van Genuchten, M. Th., "A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils," *Soil Science Society of America Journal*, 44: 892–898, 1980.

VanderKwaak, J. E., Numerical simulation of flow and chemical transport in integrated surface-subsurface hydrologic systems, *Ph.D. Thesis*, Department of Earth Science, University of Waterloo, Waterloo, ON, 1999.

VanderKwaak, J. E. and K. Loague, K. (2001). Hydrologic-response simulations for the R-5 catchment with a comprehensive physics-based model, *Water Resources Research*, 37: 999–1013, 2001, doi:10.1029/2000WR900272.

Wu, Runjian, Chen, Xingyuan, Hammond, Glenn E., Bisht, Gautam, Song, Xuehang, Huang, Maoyi, Niu, Guo-Yue, and Ferre, Ty P. 2021. "Coupling Surface Flow with High-performance Subsurface Reactive Flow and Transport Code PFLOTRAN". United States. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2021.104959>.

Yeh, G.-T., Cheng, H.-P., Huang, G., Zhang, F., Lin, H.-C., Cheng, J.-R., Edris, E., and Richards, D. (2003). *A Numerical Model Simulating Water Flow and Contaminant and Sediment Transport in WATERSHED Systems of 1-D Stream-River Network, 2-D Overland Regime, and 3-D Subsurface Media (WASH123D: Version 2.0).* Draft Report, U. S. Army Corps of Engineers, 3909 Halls Ferry Road, Vicksburg, MS 39180-6199, November 2003

Yeh, G. T., et al. (2006). "A first principle, physics-based watershed model: WASH123D." *Watershed models*, V. P. Singh, and D. K. Frevert, eds., CRC, Boca Raton, Fla.