



Technická univerzita v Liberci

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií

Numerická simulace sanace pomocí Fe nanočástic

Petr TOMEK



Obsah prezentace

- projekt
- Fe nanočástice
- model sanačního zásahu
 - model proudění
 - model transportu rozpuštěných látek
 - model transportu nanočástic
- vstupní parametry modelu
- numerická simulace
- verifikace a kalibrace modelu



Cíl projektu

V rámci projektu „Matematické modelování migrace a interakce nanočástic“ se snažíme:

- o zvýšení efektivity *in-situ* sanace Fe nanočásticemi na konkrétní lokalitě
- vytváříme obecný simulační 3D nástroj
- pro optimalizaci sanačního zásahu využíváme heuristickou metodu – nezaručuje nalezení globálního minima, tj. optimálního řešení
- z množiny možných scénářů vybereme ten, jehož výsledky splní následující dvě podmínky:
 - po skončení sanace budou zbytkové koncentrace kontaminantů nižší než limity předepsané příslušným vodoprávním úřadem
 - ekonomické náklady sanace budou minimální
- výsledky jednotlivých scénářů získáme numerickou simulací sanačního zásahu



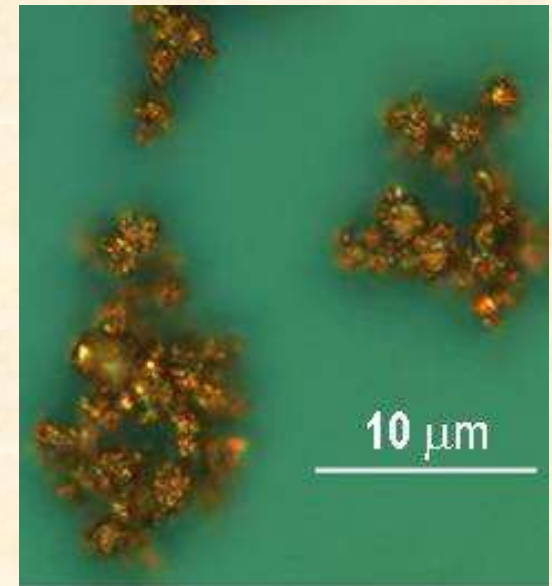
Fe nanočástice

Fe nanočástice jsou perspektivní sanační technologií:

- + nanočástice nesedimentují
- + mají měrný povrch v řádu desítek m^2/g
- + jsou vysoce reaktivní

ve vodném prostředí:

- ? snižují redox a zvyšují pH prostředí
- ?/- nesou kladný povrchový náboj
- podléhají elektrostaticky podmíněné sorpci
- agregují do shluků velikostí až desítek μm



Shluky nanočástic, nasnímano systémem obrazové analýzy LUCIA G, rozlišení: $0,1 \mu\text{m}/\text{px}$, zvětšení: 500x.



Model sanačního zásahu

- v současné době uvažujeme sanační zásah v usazených horninách bez přítomnosti výrazného puklinového systému ¹⁾
- využíváme kontinuální přístup - horninové prostředí homogenizujeme průměrováním přes REV
- uvažujeme pouze plně saturovanou zónu porézního média
- simulace sanačního zásahu se skládá z dílčích úloh:
 - proudění podzemní vody
 - transport rozpuštěných látek
 - transport nanočástic

¹⁾ předpokládá se následné využití tzv. kombinovaného modelu proudění, který je vyvíjen na TUL, viz. *Maryška, Severýn, Tauchman, Tondr: Modelling of the groundwater flow in the fractured rock – a new approach. Alogoritmy 2005.*



Model proudění podzemní vody

- proudění kapaliny v saturované zóně horninového prostředí je popsáno Darcyho zákonem a rovnicí kontinuity:

$$\mathbf{u} = -\mathbf{K}\nabla\left(\frac{p}{\rho g} + z\right),$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = q,$$

kde \mathbf{K} je tenzor hydraulické vodivosti, q je hustota zdrojů či propadů.



Model transportu rozpuštěných látek

- transport rozpuštěných látek je popsán soustavou advekčně-disperzně-reakčních parciálních diferenciálních rovnic s algebraickými vazbami zastupujícími rovnovážné reakce:

$$R \frac{\partial c_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} c_l) - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_l) = \frac{1}{\varepsilon} (c_l q^- + c_l^* q^+ + R_l), \forall l \in \{1, \dots, N\}$$

$$C_i(c_1, \dots, c_N) = 0, i \in \{1, \dots, M\}$$



Model transportu rozpuštěných látek

- transport rozpuštěných látek je popsán soustavou advekčně-disperzně-reakčních parciálních diferenciálních rovnic s algebraickými vazbami zastupujícími rovnovážné reakce:

$$R \frac{\partial c_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} c_l) - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_l) = \frac{1}{\varepsilon} (c_l q^- + c_l^* q^+ + R_l), \forall l \in \{1, \dots, N\}$$

retardační faktor

$$C_i(c_1, \dots, c_N) = 0, i \in \{1, \dots, M\}$$



Model transportu rozpuštěných látek

- transport rozpuštěných látek je popsán soustavou advekčně-disperzně-reakčních parciálních diferenciálních rovnic s algebraickými vazbami zastupujícími rovnovážné reakce:

$$R \frac{\partial c_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} c_l) - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_l) = \frac{1}{\varepsilon} (c_l q^- + c_l^* q^+ + R_l), \forall l \in \{1, \dots, N\}$$

retardační faktor

intenzita čerpání

$$C_i(c_1, \dots, c_N) = 0, i \in \{1, \dots, M\}$$



Model transportu rozpuštěných látek

- transport rozpuštěných látek je popsán soustavou advekčně-disperzně-reakčních parciálních diferenciálních rovnic s algebraickými vazbami zastupujícími rovnovážné reakce:

$$R \frac{\partial c_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} c_l) - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_l) = \frac{1}{\varepsilon} (c_l q^- + c_l^* q^+ + R_l), \forall l \in \{1, \dots, N\}$$

retardační faktor

intenzita čerpání

intenzita vtláčení

$$C_i(c_1, \dots, c_N) = 0, i \in \{1, \dots, M\}$$



Model transportu rozpuštěných látek

- transport rozpuštěných látek je popsán soustavou advekčně-disperzně-reakčních parciálních diferenciálních rovnic s algebraickými vazbami zastupujícími rovnovážné reakce:

$$R \frac{\partial c_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} c_l) - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_l) = \frac{1}{\varepsilon} (c_l q^- + c_l^* q^+ - R_l), \forall l \in \{1, \dots, N\}$$

Diagrammatic annotations for the equation above:

- retardační faktor (points to R)
- intenzita čerpání (points to $c_l q^-$)
- intenzita vtláčení (points to $c_l^* q^+$)
- kinetické reakce (points to R_l)

$$C_i(c_1, \dots, c_N) = 0, i \in \{1, \dots, M\}$$



Model transportu nanočástic

- základní mechanizmy transportu nanočástic jsou stejné jak v případě transportu rozpuštěných látek
- vlivem elektrostatické interakce mezi nanočásticemi a horninovým prostředím dochází k nerovnovážné sorpci, která může vést k lokální změně porozity
- agregaci nanočástic popisujeme kinetickou reakcí 2. řádu

$$\frac{\partial c_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_k c_k) - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_k) = \frac{1}{\varepsilon} \left(c_k q^- + c_k^* q^+ - \rho_b \frac{\partial s_k}{\partial t} + R_k \right), \forall k \in \{1, \dots, N_t\}$$

$$\frac{\rho_b}{\varepsilon} \frac{\partial s_k}{\partial t} = k_{sk} c_k - \frac{\rho_b}{\varepsilon} k_{dk} s_k,$$



Model transportu nanočástic

- základní mechanizmy transportu nanočástic jsou stejné jak v případě transportu rozpuštěných látek
- vlivem elektrostatické interakce mezi nanočásticemi a horninovým prostředím dochází k nerovnovážné sorpci, která může vést k lokální změně porozity
- agregaci nanočástic popisujeme kinetickou reakcí 2. řádu

$$\frac{\partial c_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_k c_k) - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla c_k) = \frac{1}{\varepsilon} \left(c_k q^- + c_k^* q^+ - \rho_b \frac{\partial s_k}{\partial t} + R_k \right), \forall k \in \{1, \dots, N_t\}$$

$$\frac{\rho_b}{\varepsilon} \frac{\partial s_k}{\partial t} = k_{sk} c_k - \frac{\rho_b}{\varepsilon} k_{dk} s_k,$$

nerovnovážná sorpce



Počáteční a okrajové podmínky

- pro výpočet sanace zavádíme obvyklé okrajové podmínky (Dirichletovy, Neumannovy a Newtonovy), navíc pro úlohu transportu předepisujeme počáteční podmínku pro distribuci koncentrací jednotlivých látek.

Vstupní data modelu sanace

- za předpokladu adekvátního popisu procesů probíhajících při sanaci, přesnost numerických výpočtů záleží na přesnosti vstupních dat a parametrů modelu.



Vstupní data modelu

Lokalita sanačního zásahu:

- geologická skladba lokality (mapové podklady ČGS, geologický průzkum)
- hydrogeologie
- koncentrace chemických látek v podzemí (terénní průzkum)

Vlastnosti horninového prostředí:

- propustnost hornin, disperzivita (vtlačecí a stopovací zkoušky na lokalitě)
- porozita, ... (laboratorní experimenty)



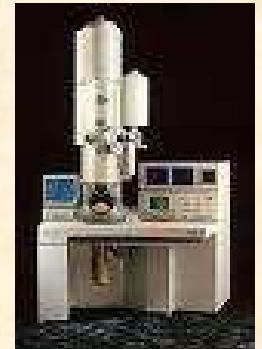
Příklad geologické stavby lokality Kuřívody.



Vstupní parametry modelu

Vlastnosti nanočástic:

- distribuce velikosti nanočástic a její časová závislost, tj. kinetické konstanty agregace (elektronová mikroskopie, obrazová analýza)
- měrný povrch nanočástic (BET analyzátoři)
- chemické složení nanočástic a jejich povrchové vrstvy





Vstupní parametry modelu

Chemické reakce:

- rychlostní konstanty jednotlivých reakcí (vsádkové experimenty)
- parametry sorpce pro jednotlivé látky (kolonové experimenty)

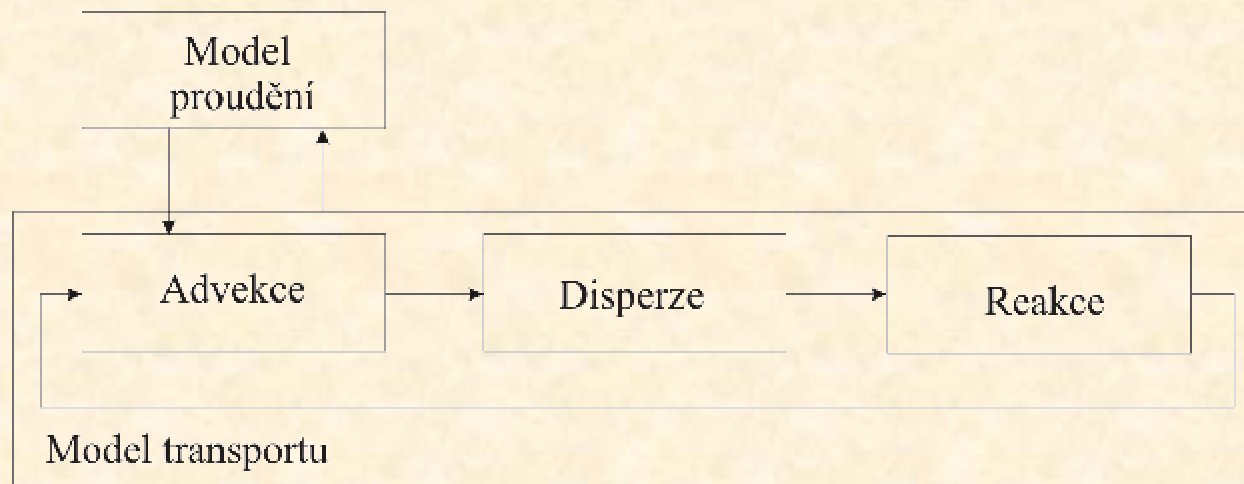
Data získané při laboratorních a terénních experimentech se následně využijí pro kalibraci modelu.





Struktura numerického modelu

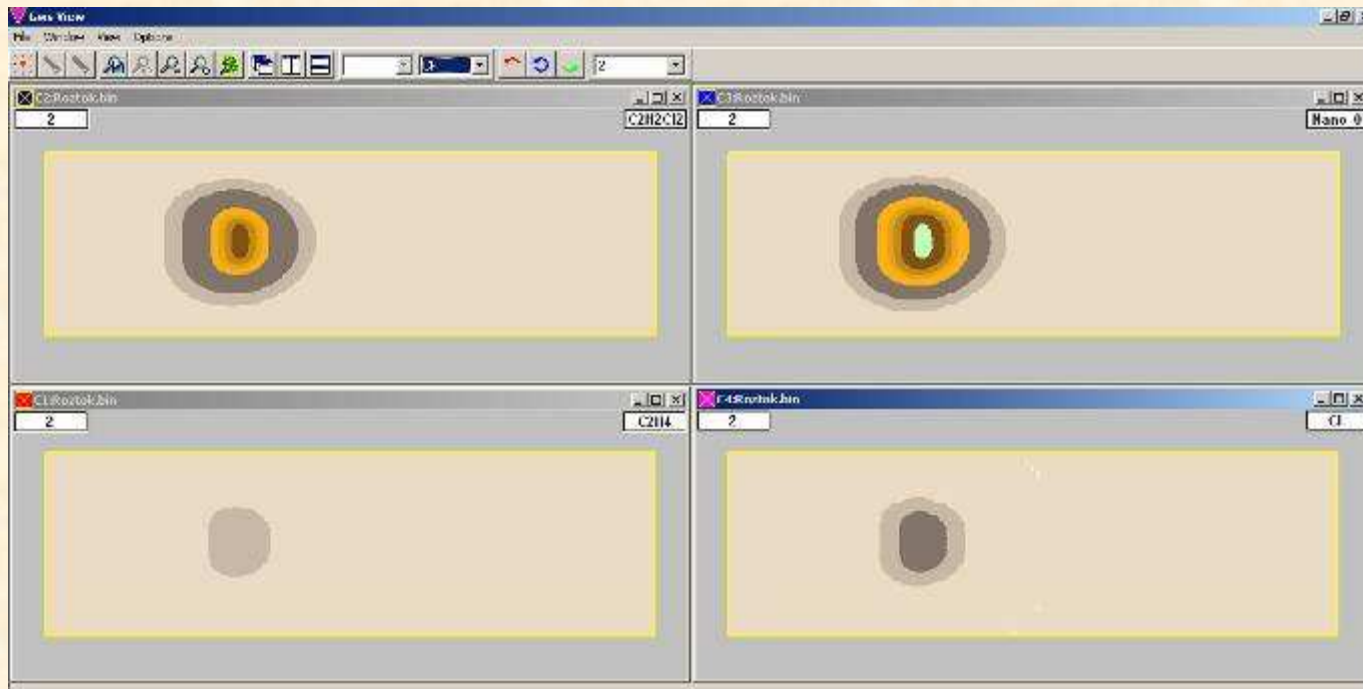
- model proudění podzemí vody je diskretizován smíšenou hybridní variantou metody konečných prvků
- model transportu je v prostoru diskretizován metodou konečných objemů a v časové oblasti metodou dělení operátoru





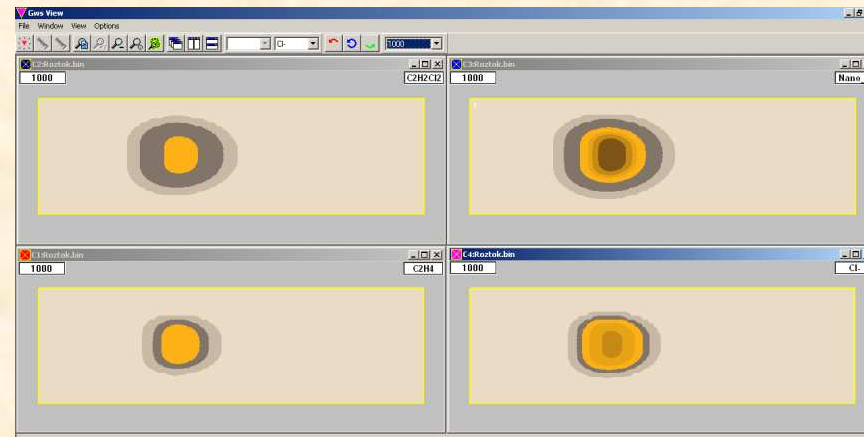
Verifikace - testovací úloha

- síť 200 x 30 x 2 elementy
- uvažujeme kinetickou reakci: $C_2H_2Cl_2 + 2Fe^0 + 2H^+ \rightarrow C_2H_4 + 2Fe^{2+} + 2Cl^-$



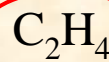
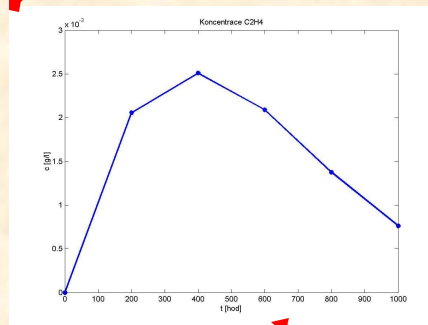
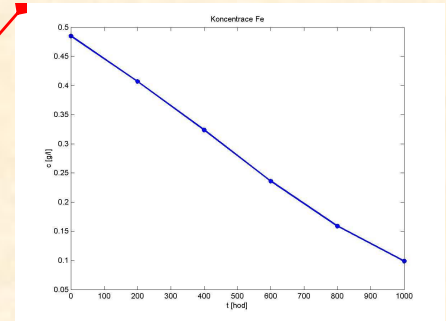
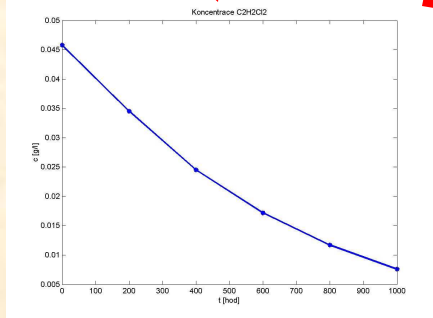
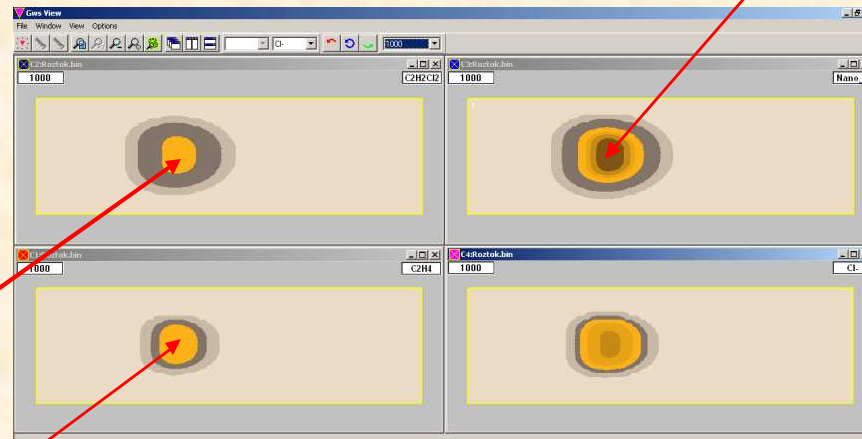


Testovací výpočet



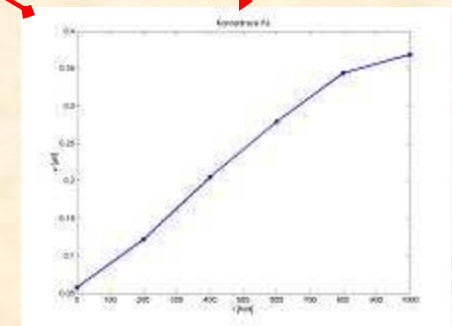
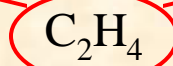
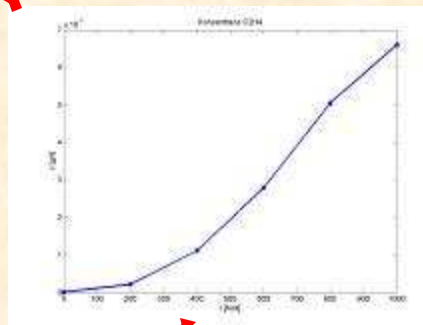
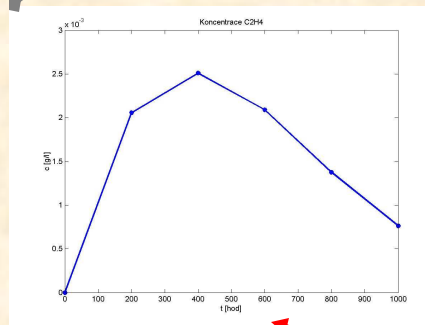
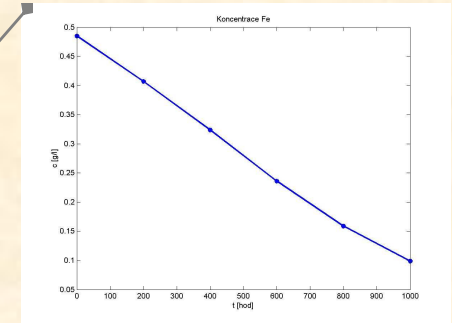
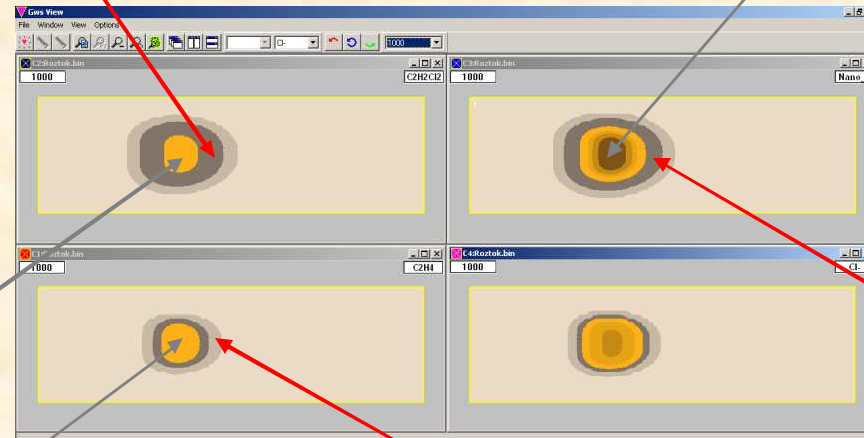
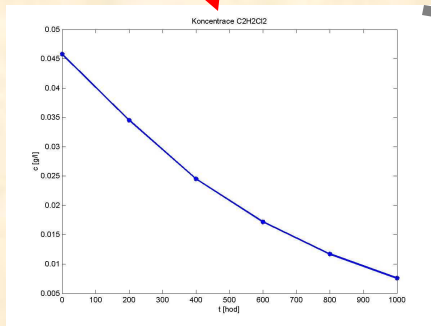
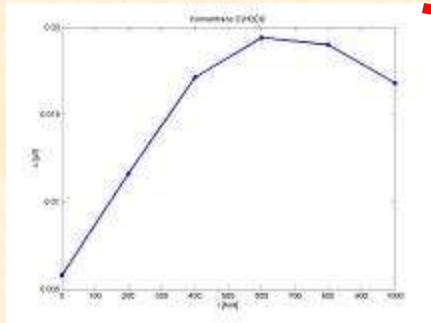


Testovací výpočet





Testovací výpočet





Verifikace modelu

V současné době probíhají další testovací výpočty, které ověřují fyzikální správnost modelu sanace a pomáhají odstranit případné chyby v popisu procesů sanace nebo chybně napsaný kód numerického modelu.

Další postup práce

- dokončení testování
- kalibrace modelu pomocí programu UCODE
- výpočet reálné úlohy sanace na lokalitě Kuřívody – výběr nejvhodnějšího scénáře sanačního zásahu



Závěr/Shrnutí

- je sestaven matematický model sanace Fe nanočásticemi
- model je implementován do podoby obecného simulačního nástroje
- probíhá verifikace modelu
- bude následovat výpočet reálné úlohy

Poděkování

Prezentované výsledky vznikají díky finanční podpoře GA AV ČR v rámci programu „Informační společnost“, grant 1ET408040515 „Matematické modelování migrace a interakce nanočástic“.



Technická univerzita v Liberci

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií

Děkuji Vám za pozornost.