

Transportně-reakční model vývoje důlních vod na uranovém ložisku

Josef Zeman

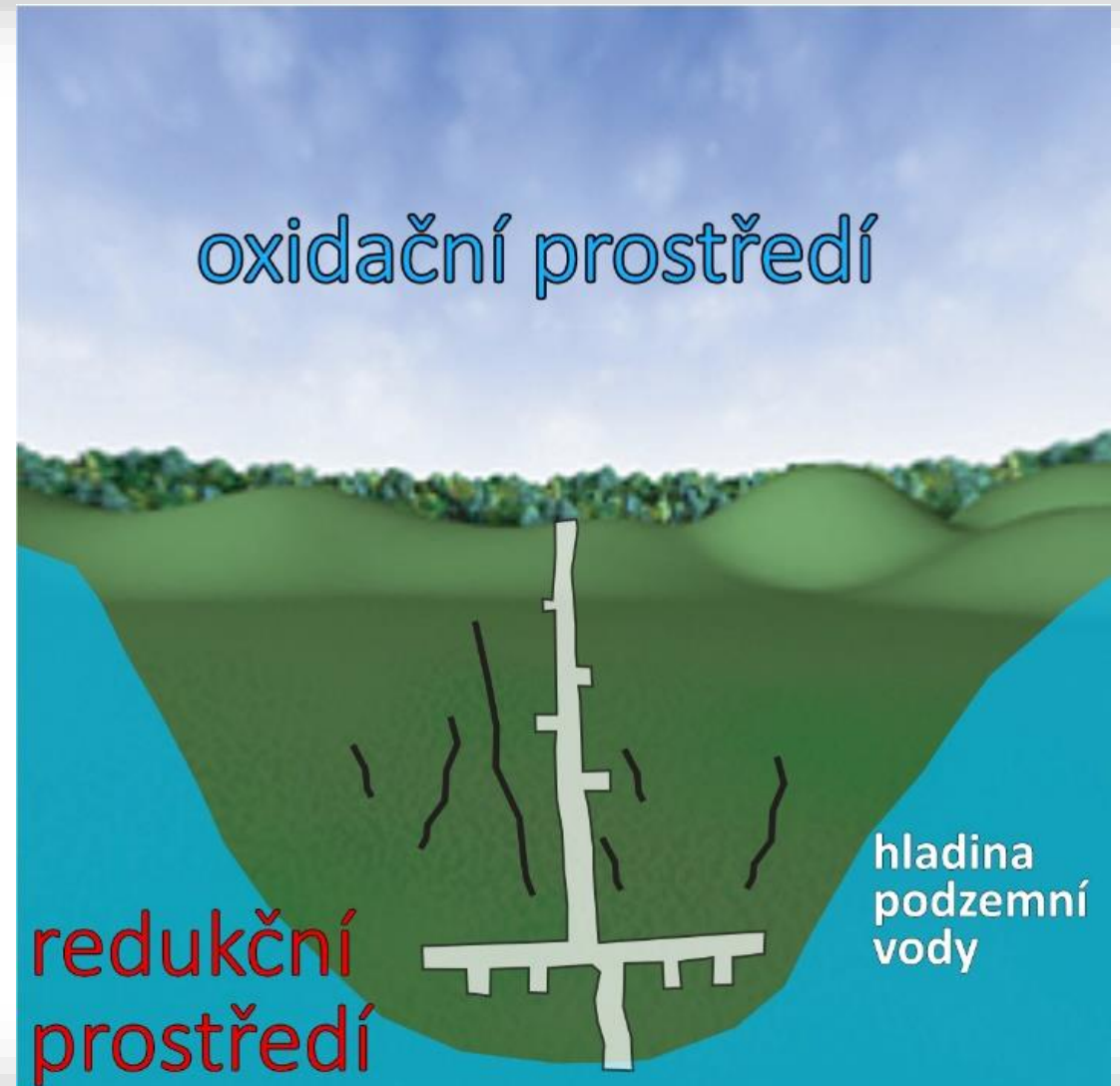
Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav geologických věd, Brno

Dílčí část projektu TH02030840 Paralelizovaný reakčně-transportní model šíření kontaminace v podzemních vodách:

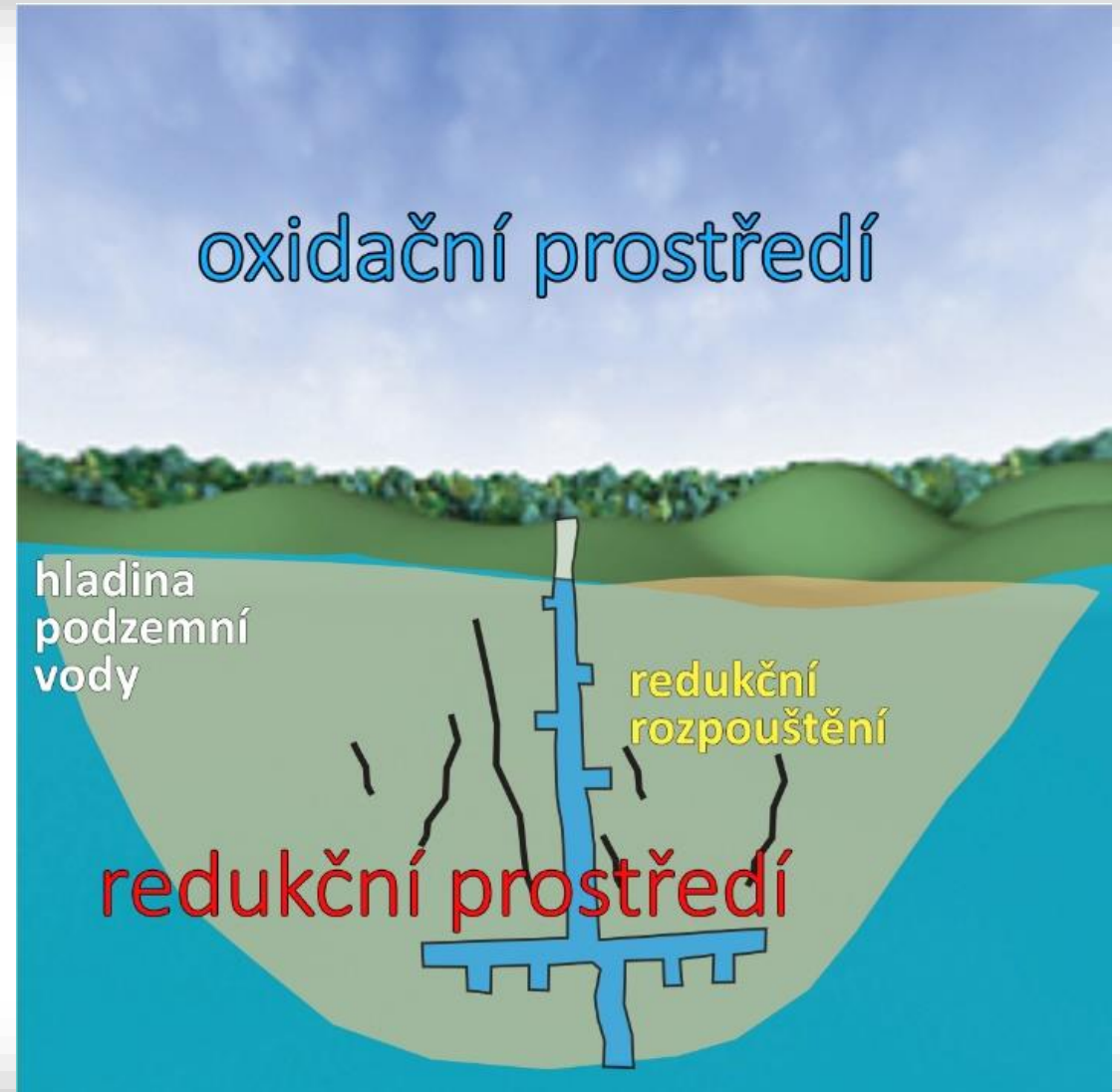
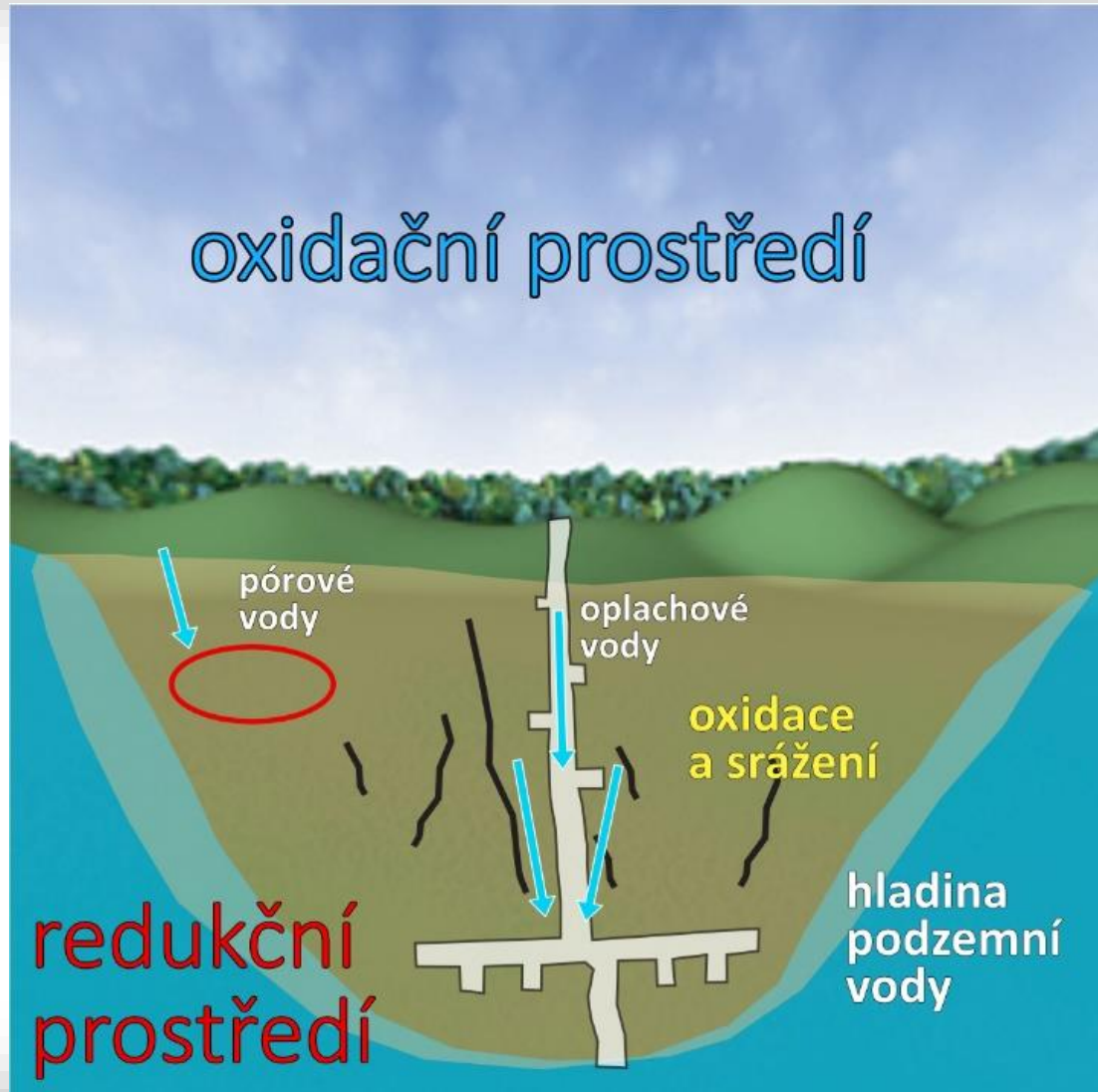
P. Štrof, DHI, a. s. (hlavní řešitel), J. Šembera, TUL, N. Rapantová, VŠB-TU,

- ❖ pohyb podzemní vody (hydrogeologie – transport)
- ❖ interakce voda-hornina-atmosféra (geochemie – reakční část)
- ❖ propojení: transportně-reakční modelování
- ❖ rychlost interakcí: kinetika
- ❖ hlavní problém: časová náročnost výpočtů

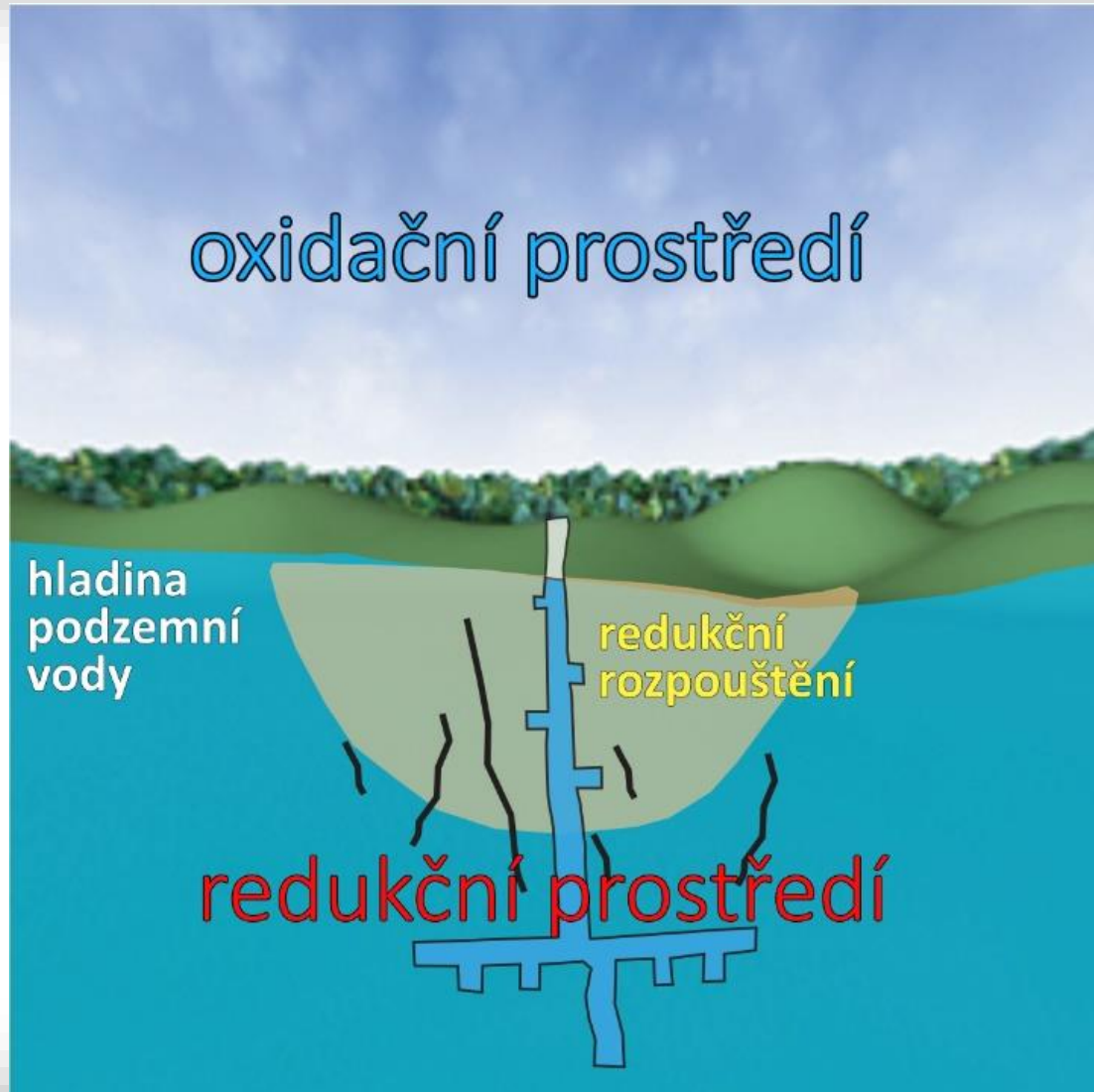
Základní procesy



Základní procesy



Základní procesy



❖ Pyrit FeS_2

- ❖ FeS_2 (pyrit) + H_2O + 3,5 $\text{O}_2(\text{aq}) \rightarrow \text{Fe}^{2+} + 2 \text{SO}_4^{2-} + 2 \text{H}^+$
- ❖ $\text{Fe}^{2+} + 1,5 \text{H}_2\text{O} + 0,25 \text{O}_2(\text{aq}) \rightarrow \text{FeOOH}$ (goethit) + 2 H^+

❖ Kalcit CaCO_3

- ❖ $\text{CO}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{aq})$
- ❖ $\text{CO}_2(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{CO}_3$
- ❖ $\text{H}_2\text{CO}_3 \rightarrow \text{H}^+ + \text{HCO}_3^-$
- ❖ $\text{HCO}_3^- \rightarrow \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-}$
- ❖ $\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} \rightarrow \text{CaCO}_3$ (kalcit)

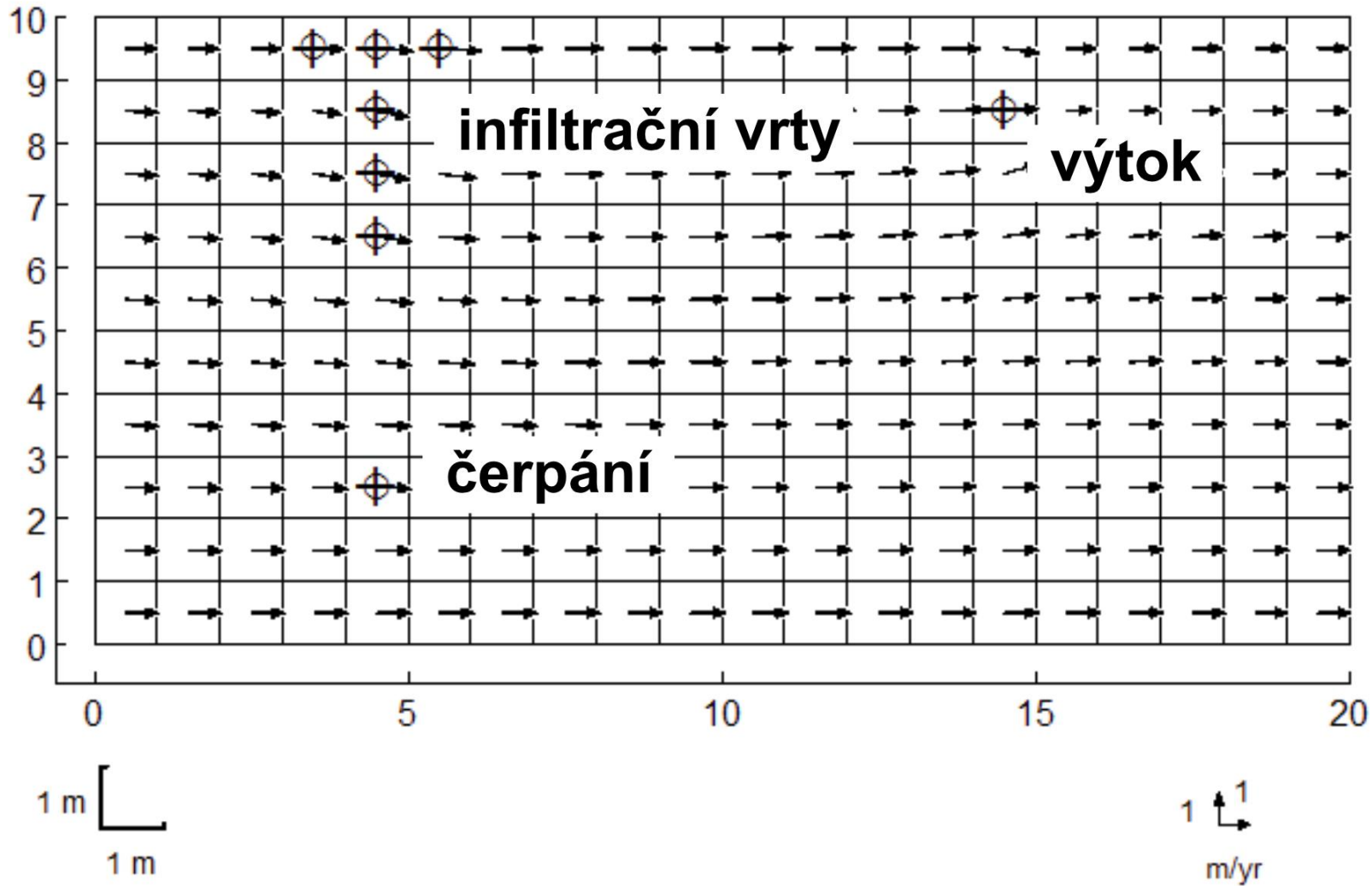
❖ Uraninit UO_2

- ❖ UO_2 (uraninit) + 2 H^+ + 0,5 $\text{O}_2(\text{aq}) \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{UO}_2^{2+}$

❖ Organické látky

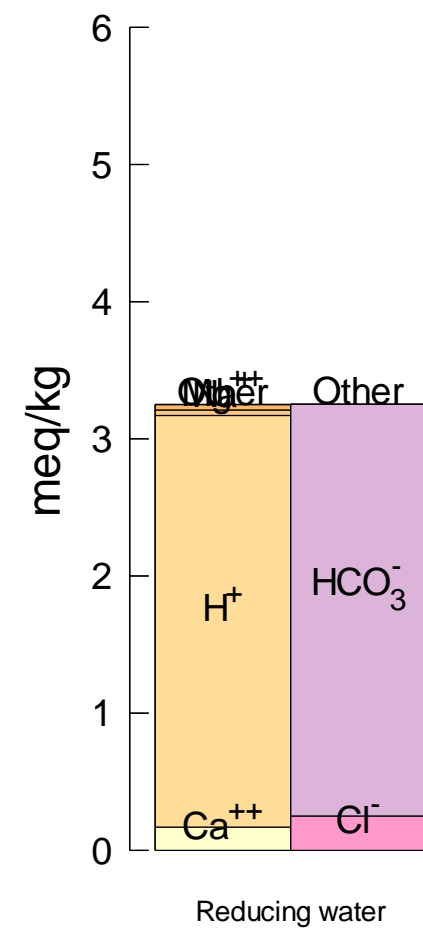
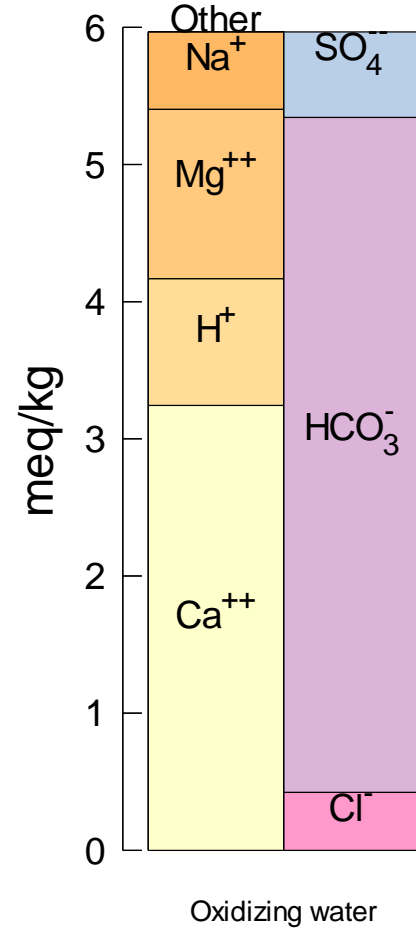
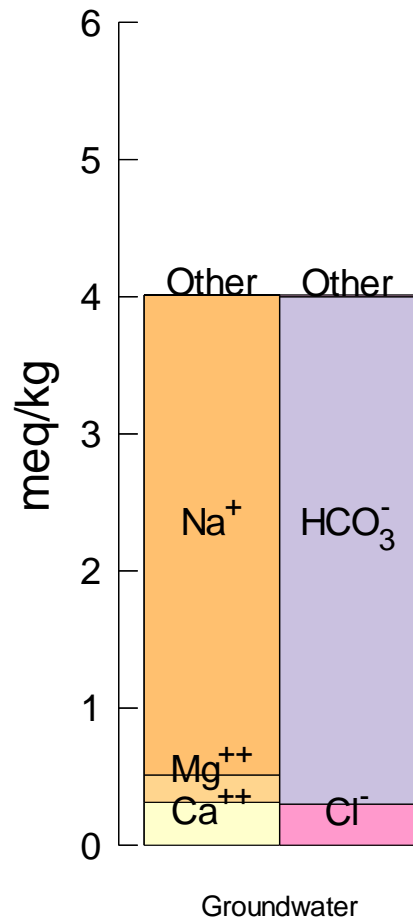
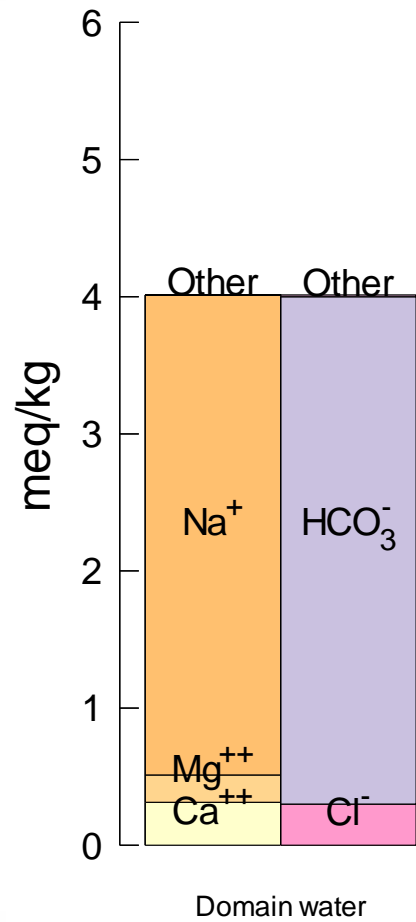
- ❖ $\text{C}^0\text{H}_2\text{O} \rightarrow 0,5 \text{C}^{-\text{IV}}\text{H}_4(\text{aq}) + 0,5 \text{C}^{+\text{IV}}\text{O}_2(\text{aq})$
- ❖ $\text{C}^0\text{H}_2\text{O}(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 4 \text{e}^- + 4 \text{H}^+ + \text{C}^{+\text{IV}}\text{O}_2(\text{aq})$

Volba domény

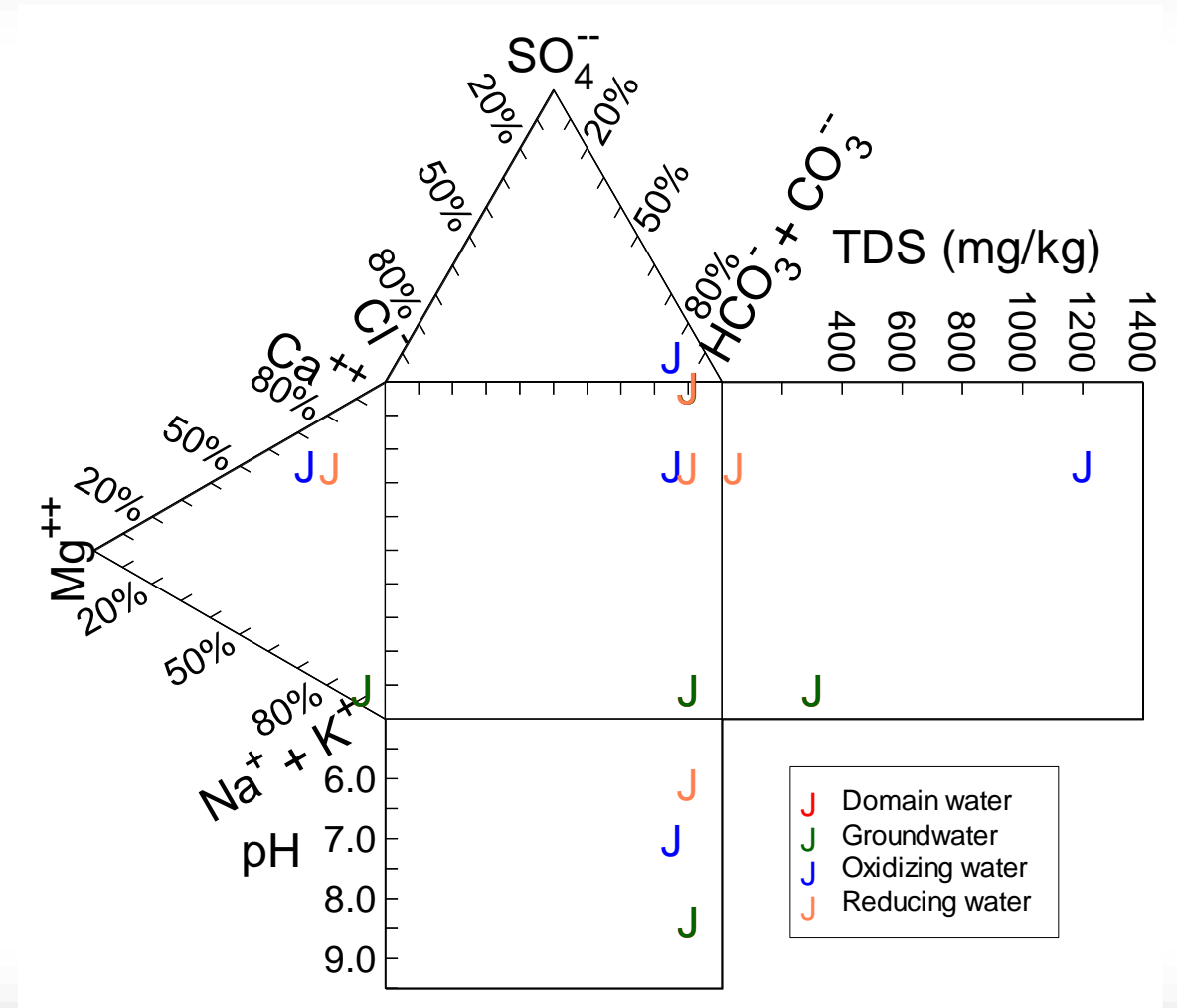
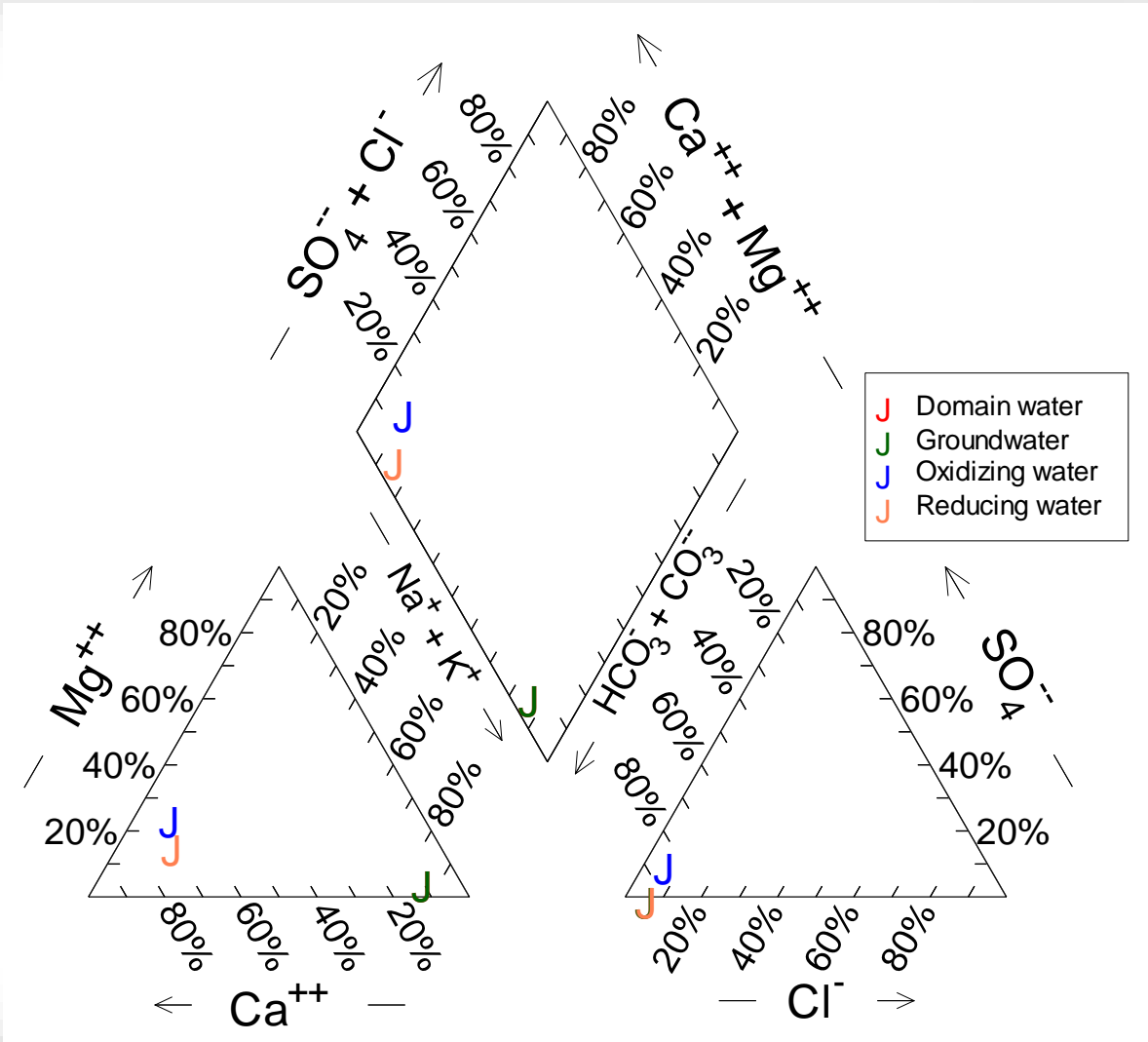


- ❖ Úvodní etapa (lag etapa): 20 let (interval 0–20 let)
- ❖ Oxidační etapa: 130 let (interval 20–150 let)
- ❖ Redukční etapa: 120 let (interval 150–220 let)
- ❖ Etapa „vypláchnutí“ (flush etapa): 80 let (220–300 let)

Složení vod

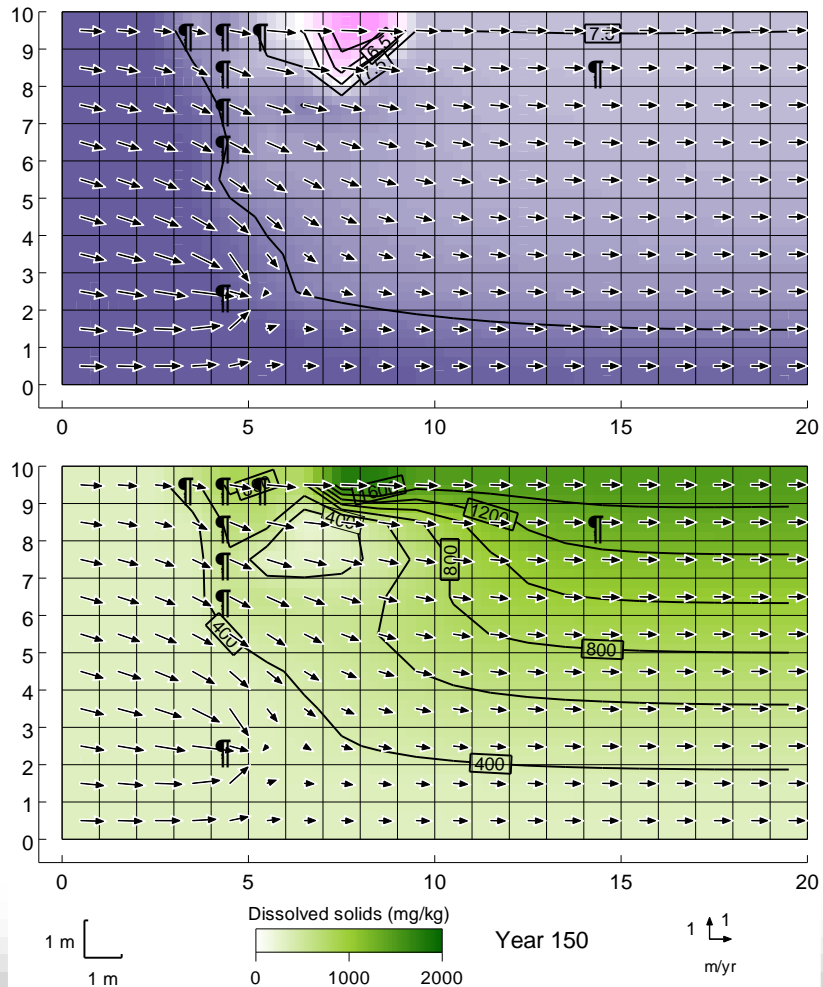


Složení vod

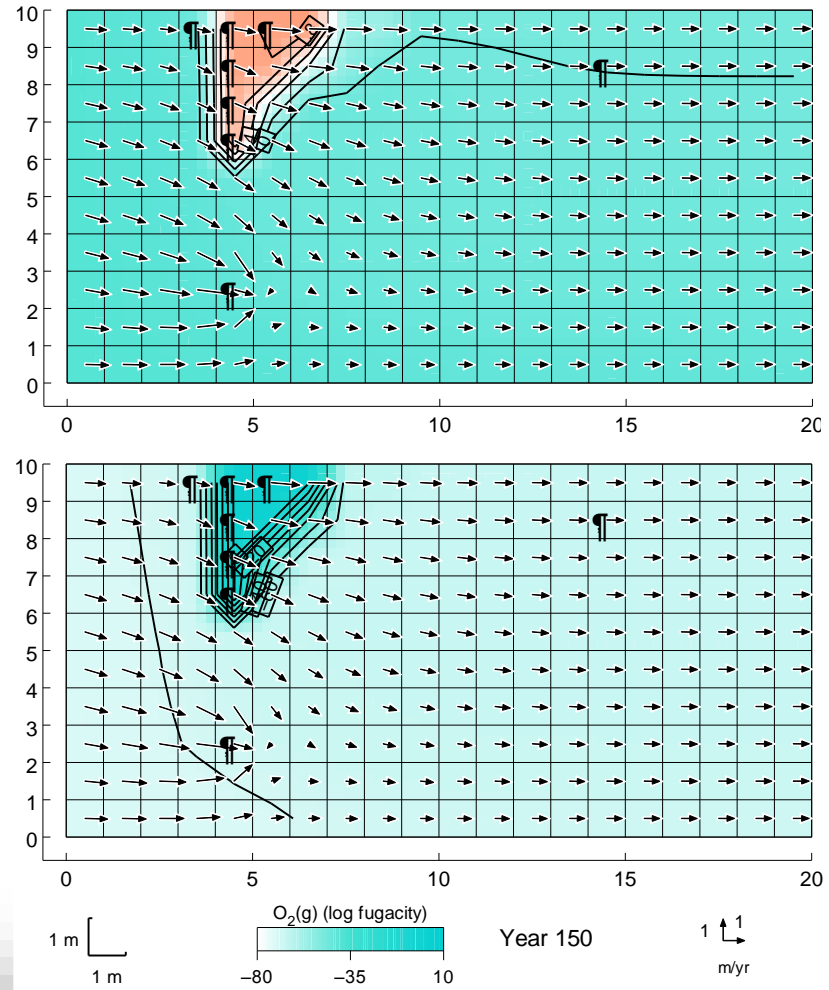


Vývoj po 150 letech

❖ pH a TDS

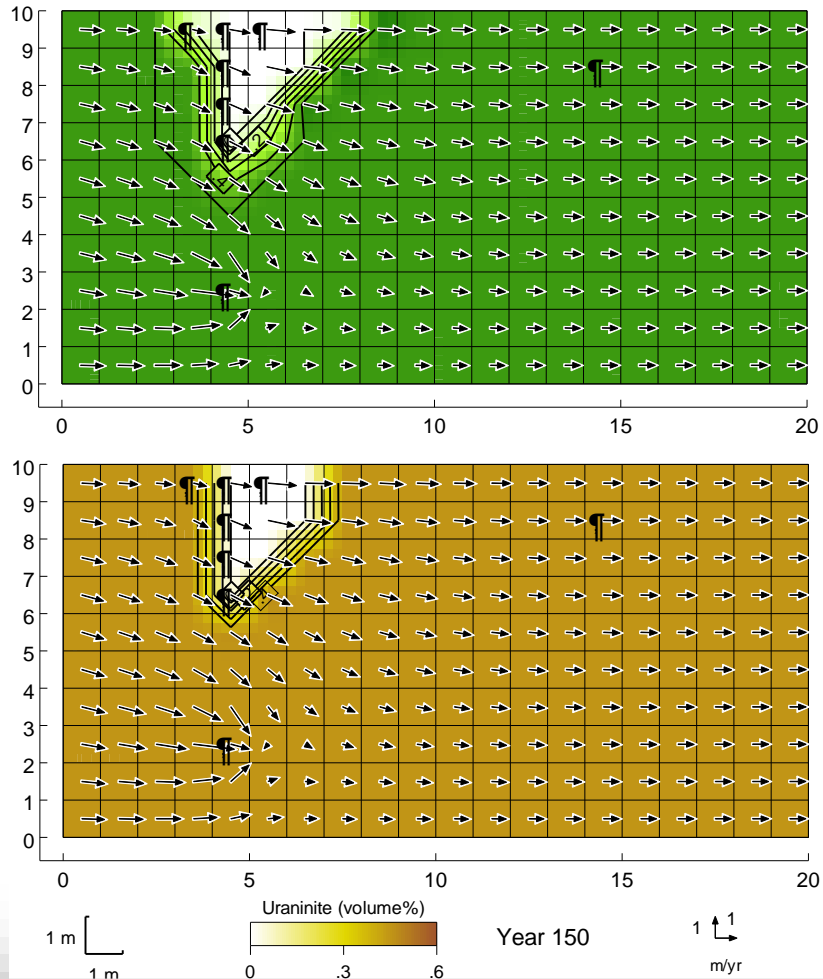


❖ Eh a f_{O_2}

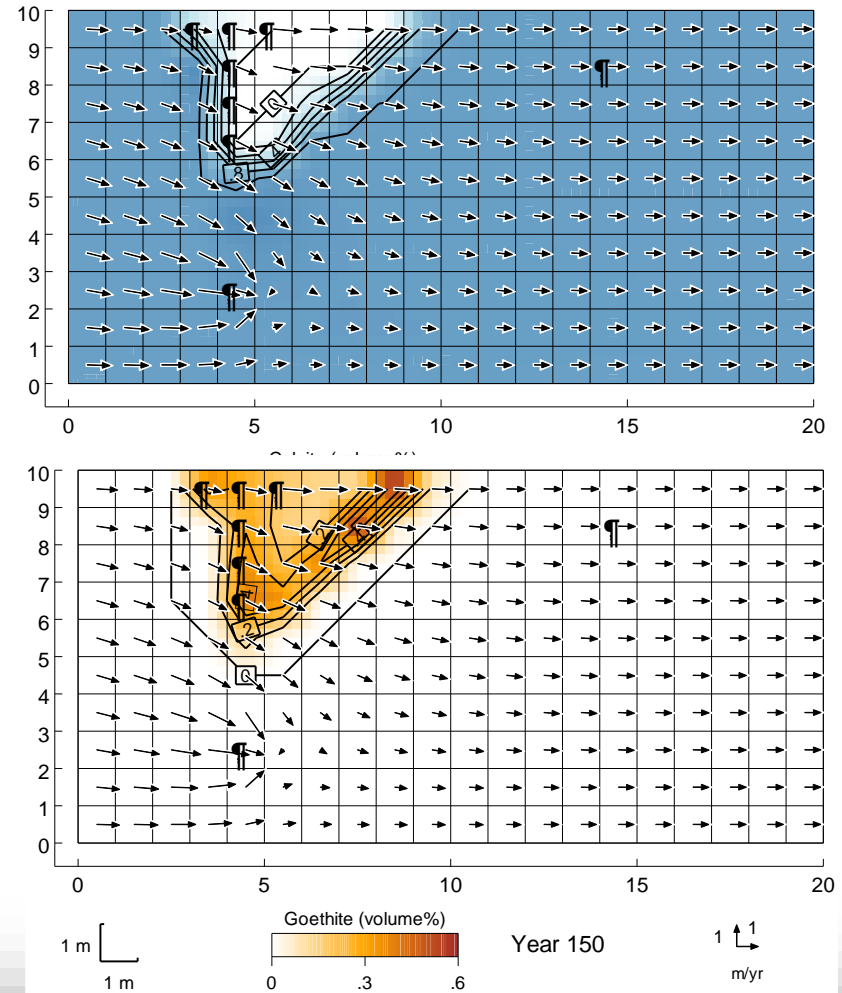


Vývoj po 150 letech

❖ pyrit a uraninit

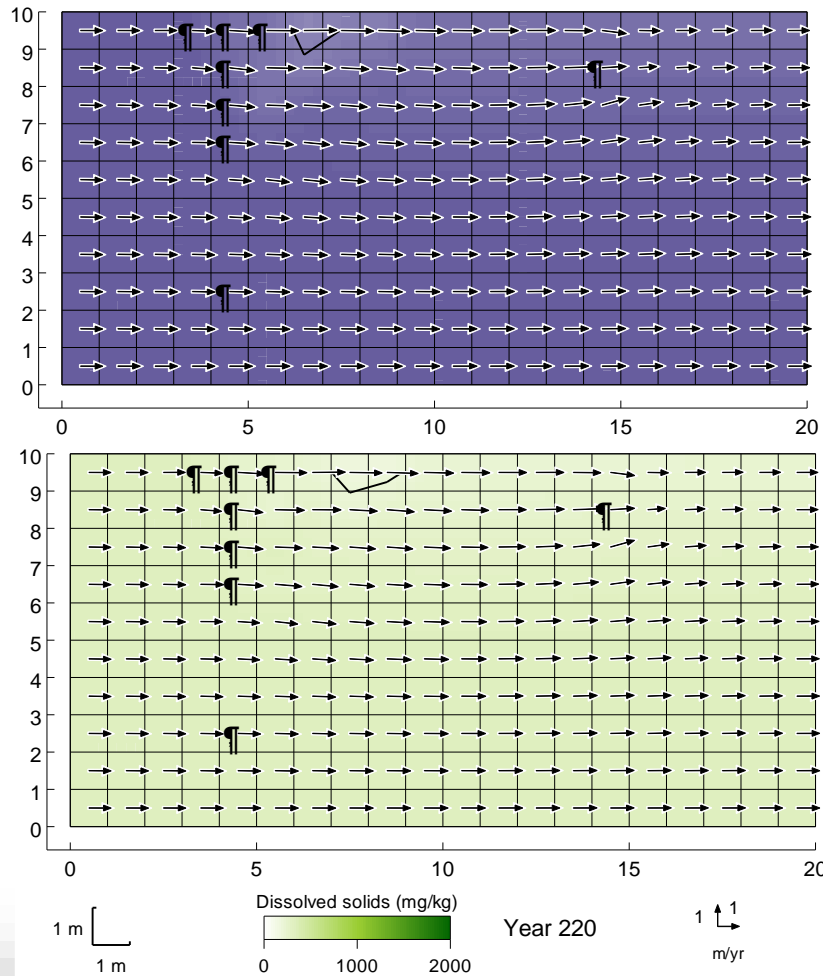


❖ kalcit a goethit

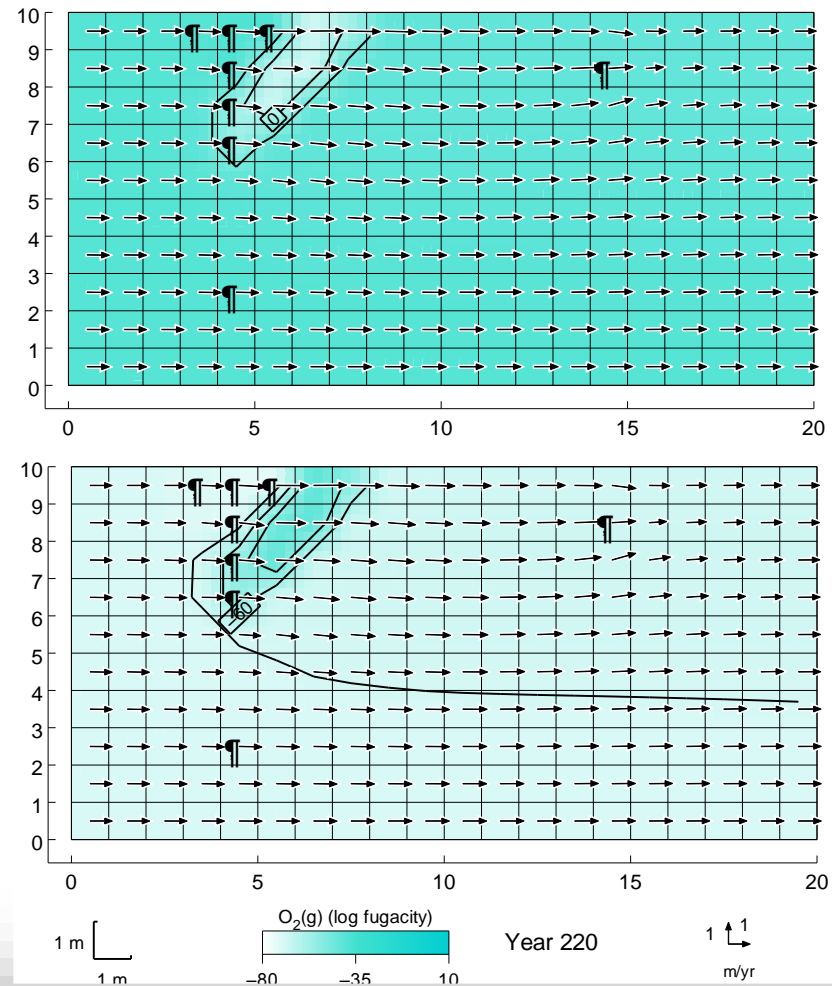


Vývoj po 220 letech

❖ pH a TDS

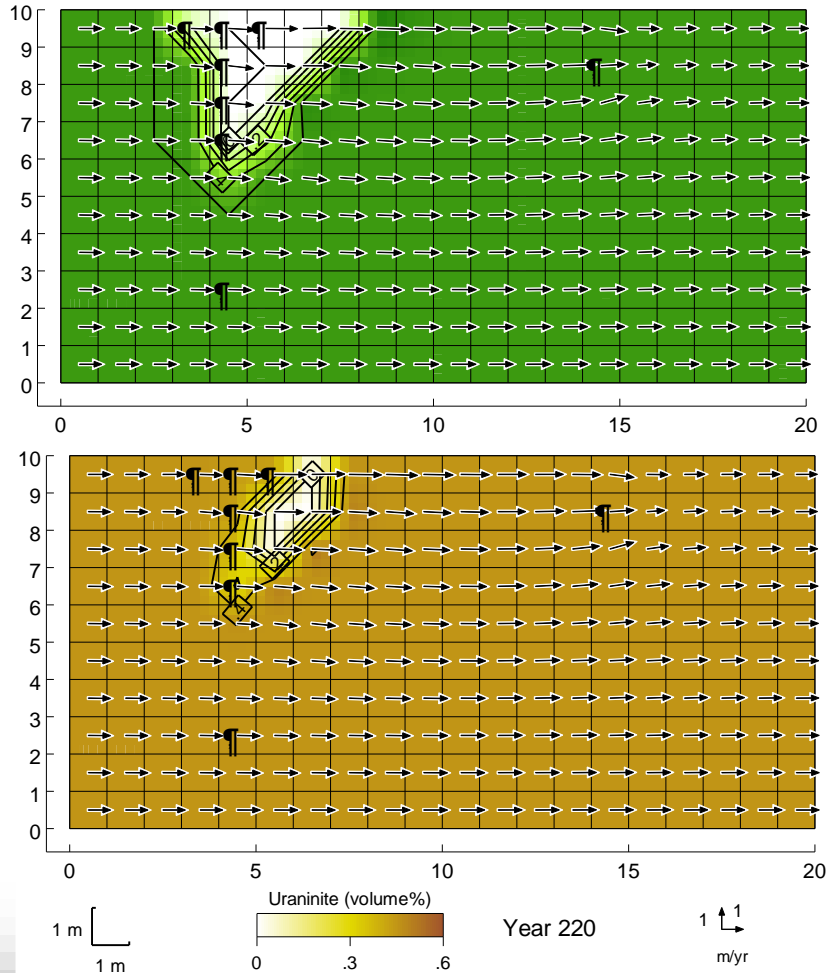


❖ Eh a f_{O_2}

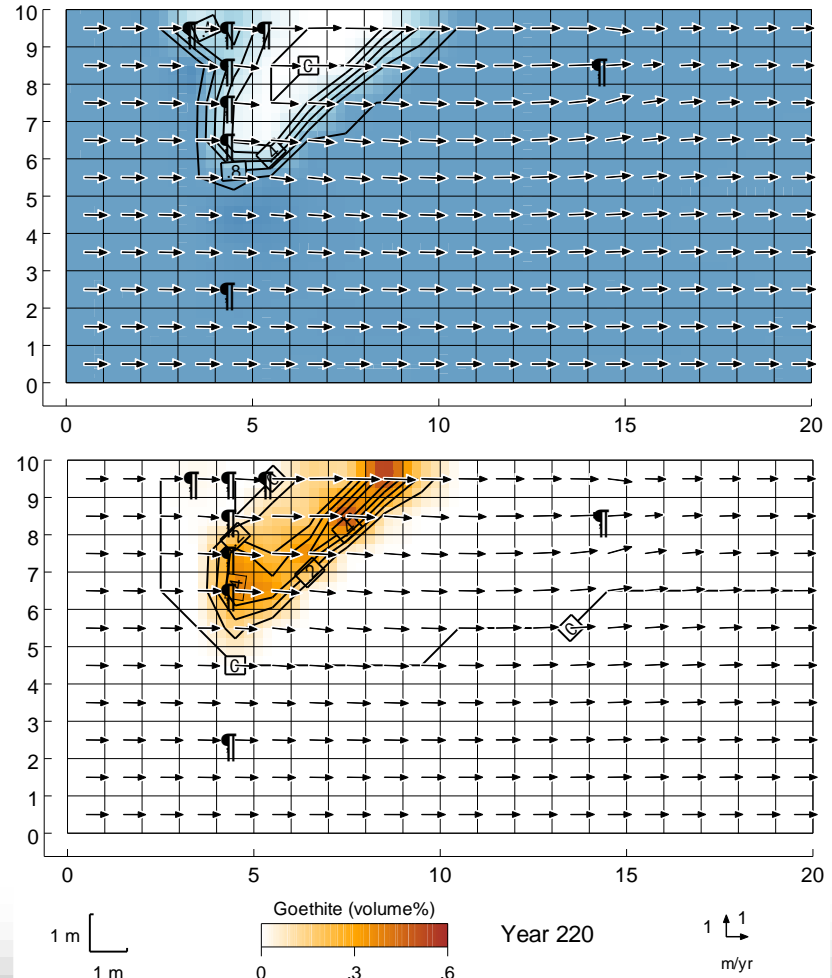


Vývoj po 220 letech

❖ pyrit a uraninit

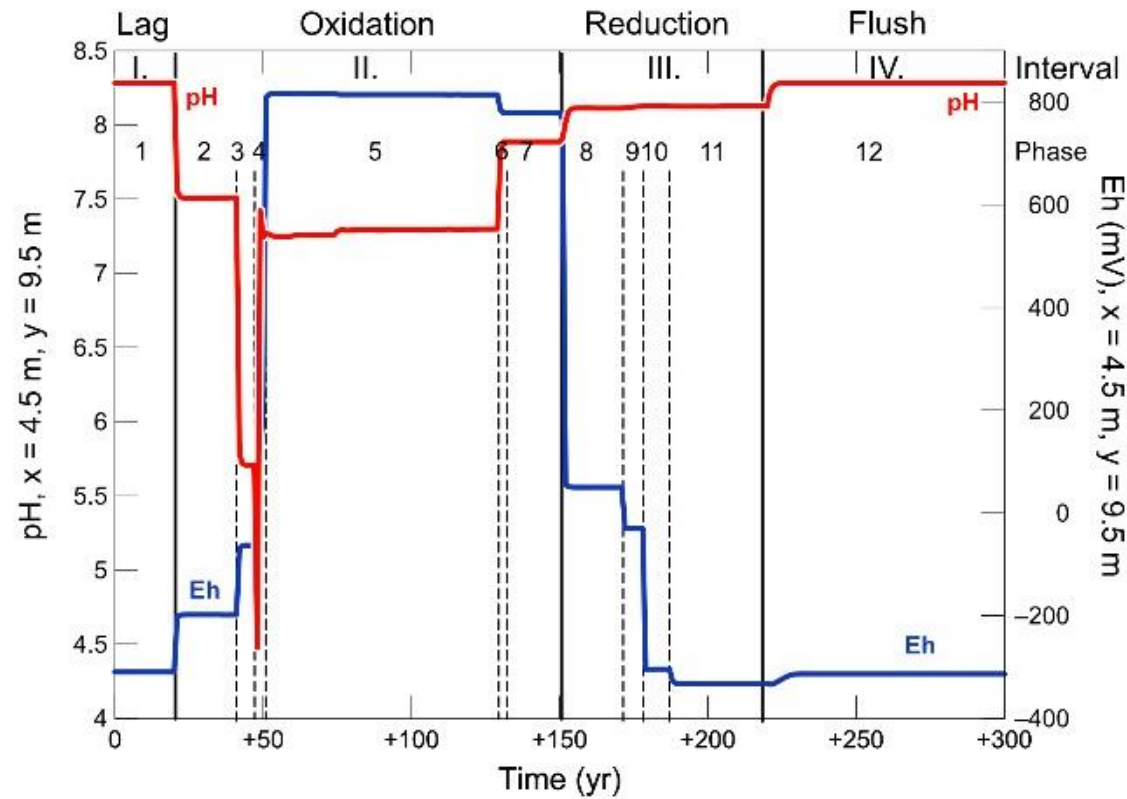


❖ kalcit a goethit

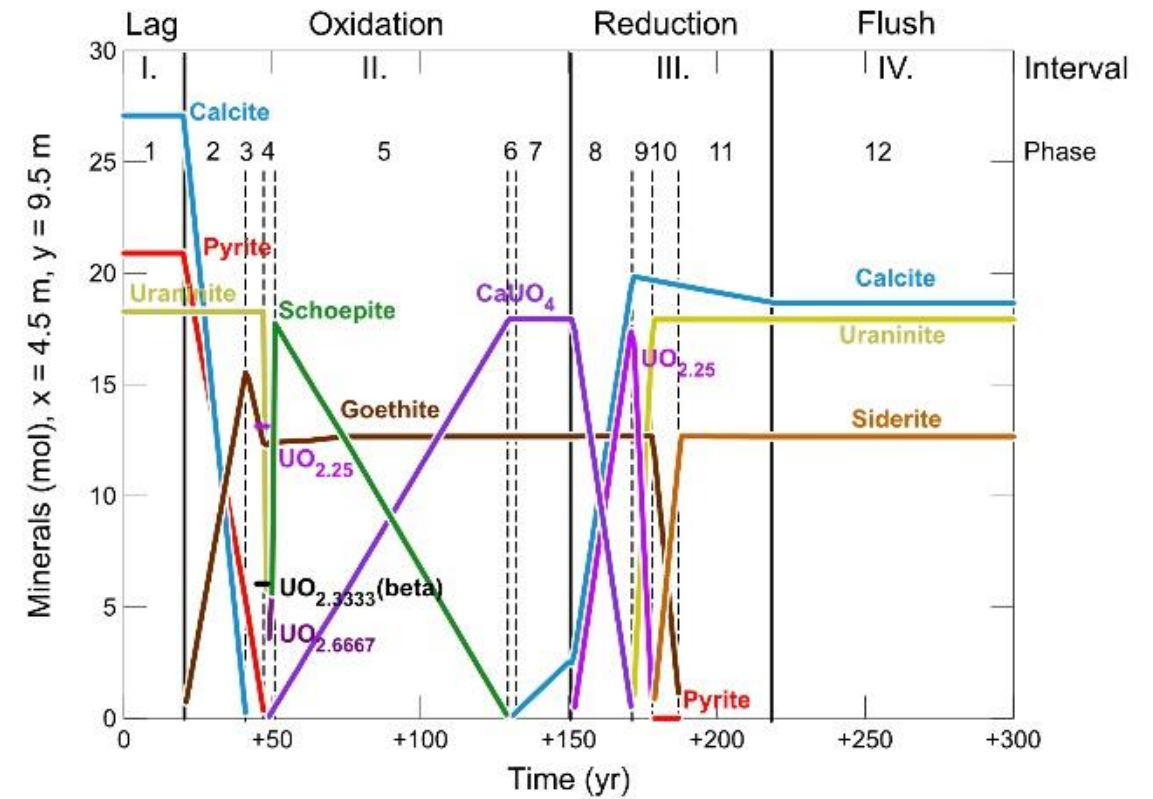


Časový vývoj v jedné buňce

❖ pH a Eh

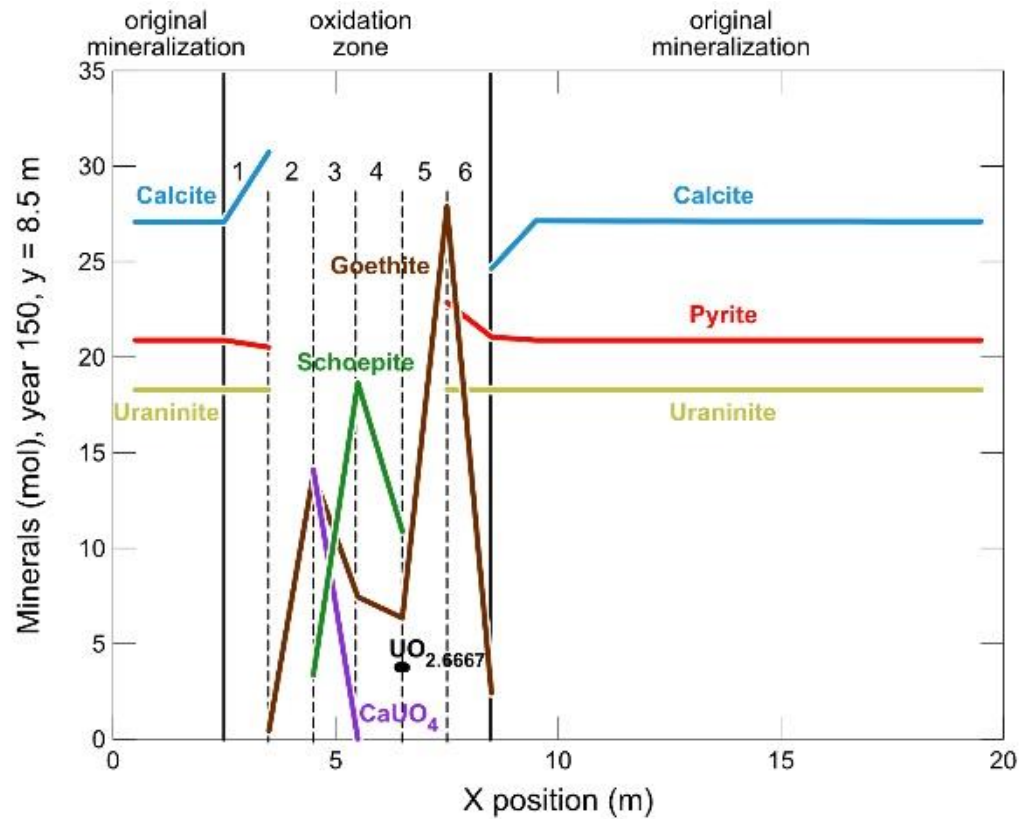


❖ minerály

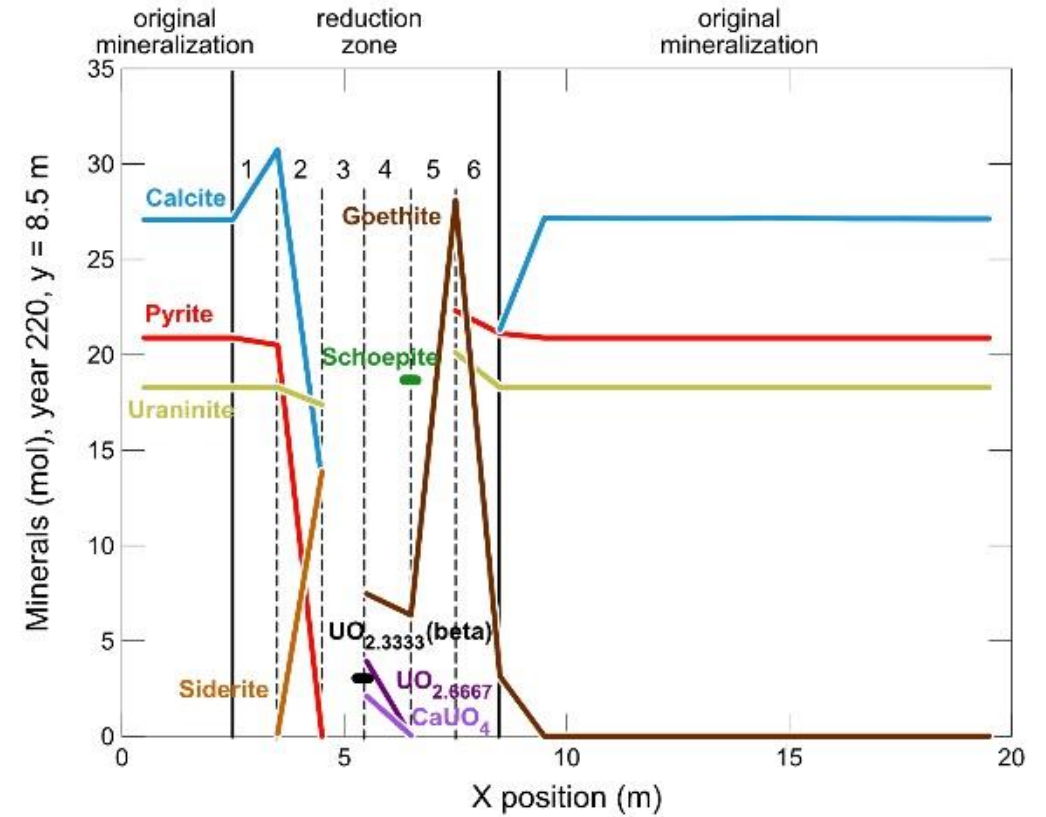


Vývoj v profilu v určitém čase

❖ 150 let



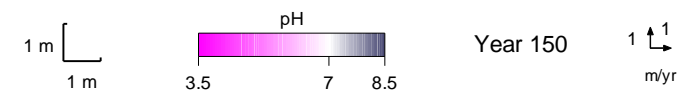
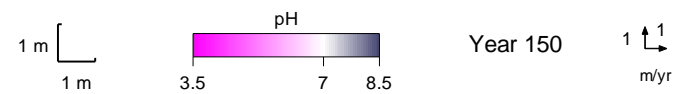
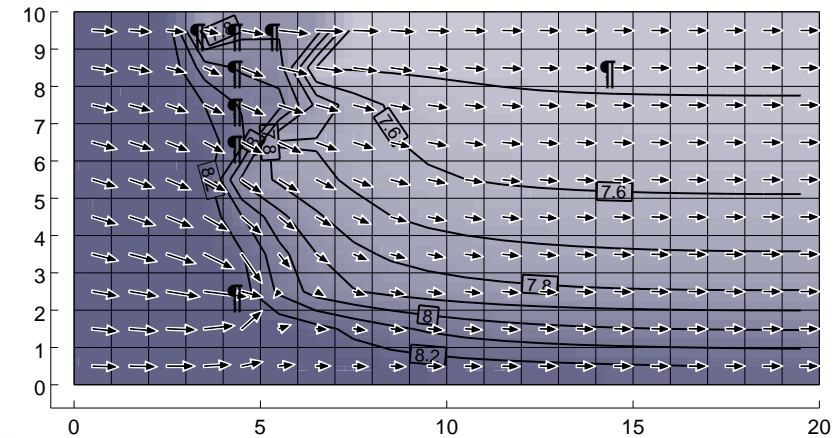
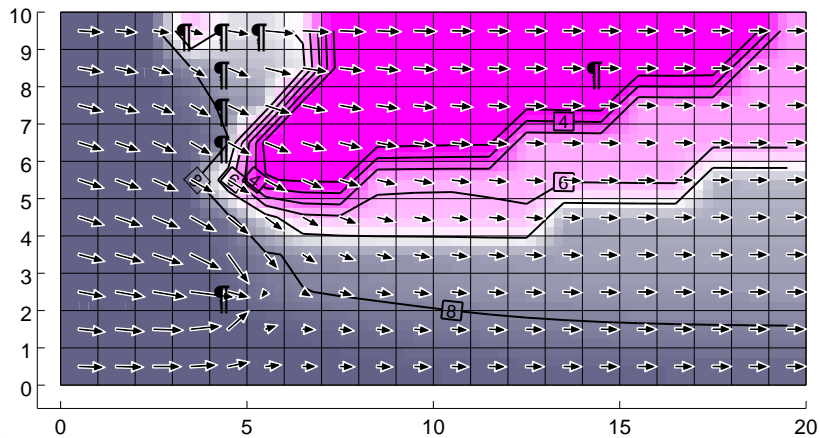
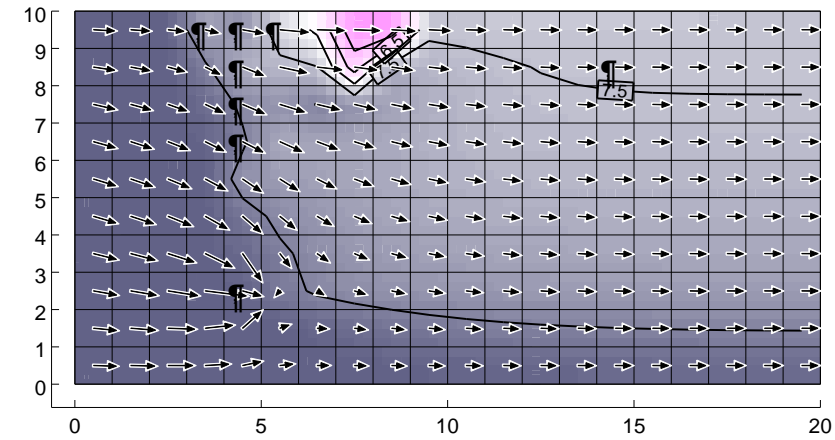
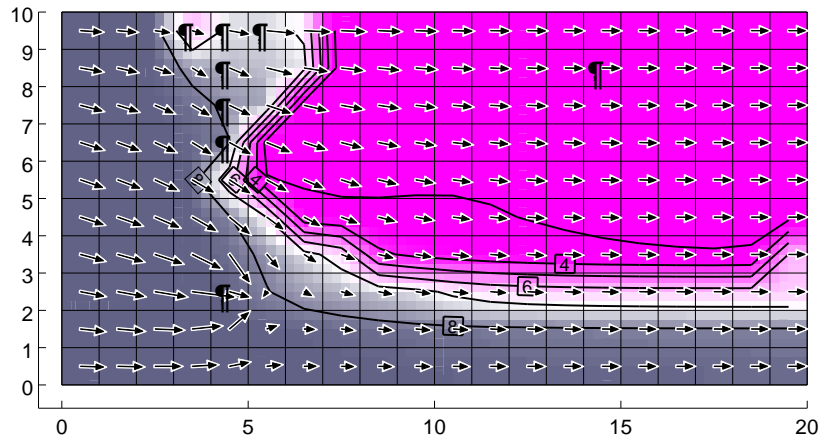
❖ 220 let



Vliv zastoupení minerálů v doméně na pH

❖ kalcit 0,01 a 0,10 obj. %

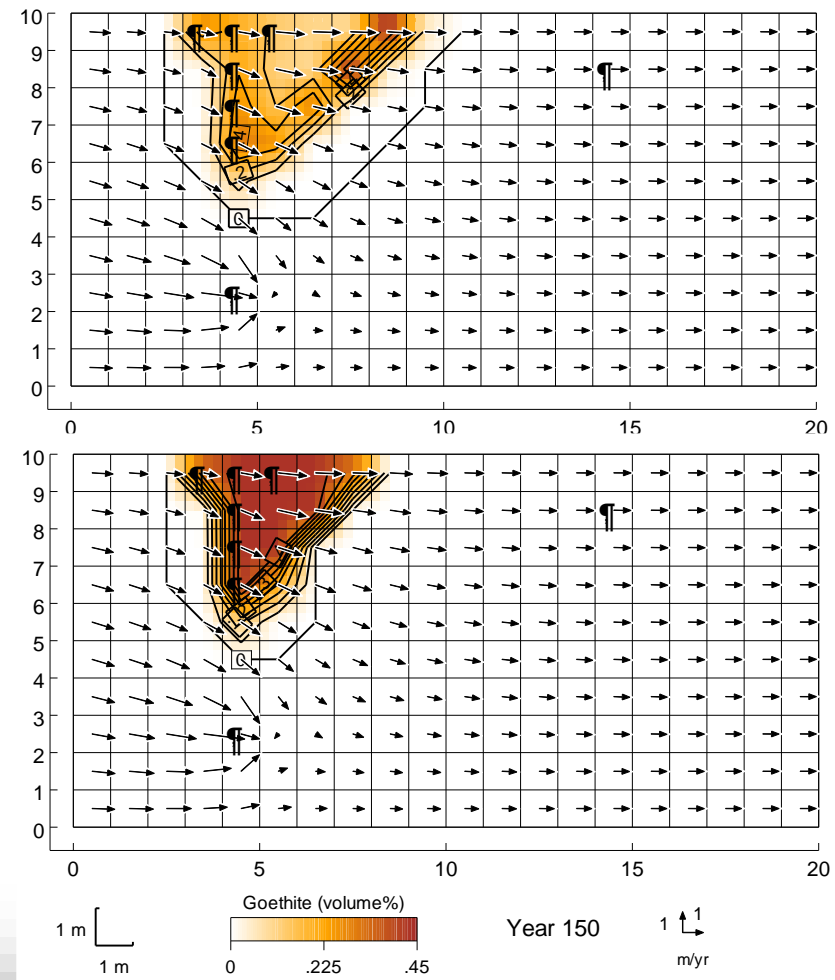
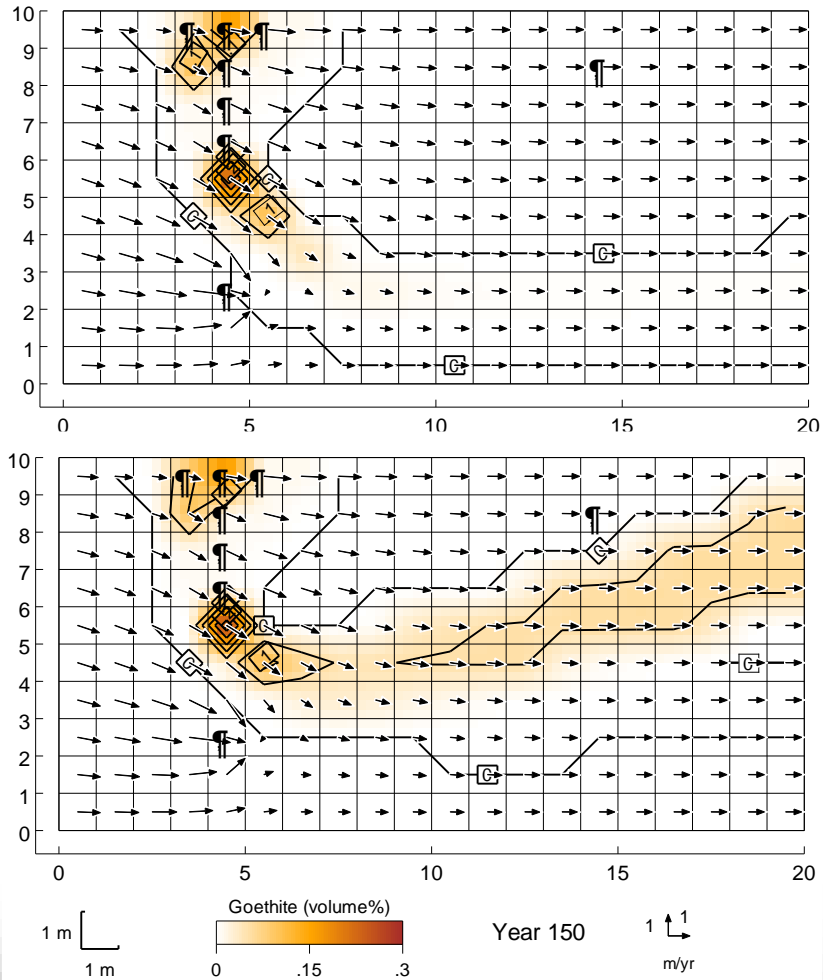
❖ kalcit 1,0 a 5,0 obj. %



Vliv zastoupení minerálů v doméně na tvorbu goethitu

❖ kalcit 0,01 a 0,10 obj. %

❖ kalcit 1,0 a 5,0 obj. %



Časová náročnost výpočtu

základní doména s 200 buňkami				
krok	interval	jeden krok	počet kroků	doba výpočtu
	rok	hod.	mil	hod.
1.90E-06	300	5.0	157.9	3.2
7.62E-07	300	2.0	393.7	7.2
3.80E-07	300	1.0	789.5	14.0
„zahuštěná“ doména s 800 buňkami				
1.90E-06	300	5.0	157.9	11.69

- ❖ Základní model – interakcí se účastní:

- ❖ 10 minerálů
- ❖ 324 specií
- ❖ 29 plynů

- ❖ Zjednodušený model (koncentrace $> 1 \times 10^{-6}$ mol l⁻¹):

- ❖ 10 minerálů
- ❖ 28 specií
- ❖ 8 plynů

Zjednodušení modelu

úplný model				
krok	interval	jeden krok	počet kroků	doba výpočtu
	rok	hod.	mil	min.
1.90E-06	300	5.0	157.9	189.4
zjednodušený model				
1.90E-06	300	5.0	157.9	27.5
4.57E-05	300	120.1	6.6	1.3
9.13E-05	300	239.9	3.3	0.7

- ❖ Připraven transportně-reakční model
 - ❖ acidobazické reakce
 - ❖ oxidačně-redukční reakce
 - ❖ oxidační rozpouštění a srážení minerálů
 - ❖ redukční rozpouštění a srážení minerálů
- ❖ Připraven postup zjednodušení transportně-reakčního modelu
 - ❖ zkrácení výpočetního času na 1/260
 - ❖ zachována výpovědní hodnota modelu
- ❖ Využití superpočítače IT4I dává naději na simulaci vývoje reálného horninového prostředí.

Děkuji za pozornost

