

Dva příklady heuristických modelů pro modelování chemických reakcí v proudící tekutině*

Jan Šembera

*Technická univerzita v Liberci, Výzkumné centrum Pokročilé sanační technologie a procesy
e-mail: jan.sembera@tul.cz*

Abstrakt

Použití softwarových nástrojů pro modelování podzemních procesů a jako podkladu pro jejich řízení je v současné době standardní přístup. V této oblasti existují komerční i volně šiřitelné programy různé úrovně, jejich užití má však v konkrétních aplikacích mnoho úskalí. Většina omezení vyplývá z univerzálnosti takových software. Jednak univerzální software nemůže optimálně využít všechna dostupná data (úlohu je třeba přizpůsobit možnostem modelu), jednak musí být koncipován robustně, tedy tak, aby „za každou cenu dodal výsledek“ – to vyžaduje aplikaci robustních numerických metod, které nelze dobře optimalizovat, a důsledkem je vysoká náročnost na výpočetní prostředky a čas.

Modely běžně užívané pro výpočet proudění (např. MODFLOW) lze obvykle svázat s univerzálními softwarovými prostředky pro modelování transportu látek (MT3D, MOC3D) a chemických rovnováh a kinetických reakcí (např. CHAQS, CHESS, HARPHRQ, JESS, MINEQL, PHREEQC) a užívají se v sanační praxi k predikci účinnosti hydrogeologických zásahů. Jsou však obvykle založeny na základních numerických metodách a mají zásadní omezení na topologii sítě a geometrii modelu a vysoké nároky na výpočetní čas.

Pro možnost modelově postihnout tyto procesy je tedy nezbytná schopnost modelu dostatečně přesně a s malými nároky na výpočetní čas a prostor popsat rychlost a kvalitu změn chemického složení roztoku a zejména srážení pevné fáze, která může způsobovat změnu hydrologických vlastností horninového prostředí.

Chemické reakce jsou z pohledu modelování součástí problému transportu látek. Mají však z tohoto hlediska dvojí velmi rozdílný charakter. Kinetické chemické děje se projeví jako členy konvekčně-reakčně-disperzní rovnice a rovnovážné chemické děje se projeví jako algebraické vazby mezi koncentracemi jednotlivých složek roztoku. Transportní úloha má tedy charakter parabolické parciální diferenciální rovnice s algebraickou vazbou a jako taková musí být řešena. Připomeňme, že za kinetické považujeme ty chemické reakce, které probíhají jedním směrem určitou konečnou rychlostí. Za rovnovážné považujeme reakce, které probíhají oběma směry a ustavují rovnováhu v časech kratších než diskretizační krok časové diskretizace.

Komplikace při řešení reálných úloh obecně vyplývají ze dvou zdrojů: z časové náročnosti přesných výpočtů modelovaných procesů v rozsáhlé oblasti (v případě chemických modelů jde zejména o velké množství časových kroků výpočtu na velkém množství konečných

* This result was realized with subvention of the budget of the Czech Republic through the project Advanced Remedial Technologies and Processes No. 1M0554 of the programme Research Centres (PP2-DP01) of the Ministry of Education, Youth, and Sports and with subvention of Grant Agency of the Czech Republic under project No. 102/06/P450.

objemů) a z nedostatku dat pro přesné určení parametrů výpočtu (v reálných aplikacích jde hlavně o parametry vzájemných chemických reakcí mnoha desítek chemických látek v prostředí, které se neshoduje s laboratorními podmínkami). Při řešení reálných úloh je tedy třeba kromě návrhu a testování „přesných“ modelů popisujících co nejpřesněji známé chemické děje (zde lze s výhodou užít komerčních a volně dostupných modelů) také navrhnout zjednodušené chemické modely. Zjednodušení může spočívat jednak v zahrnutí menšího počtu vybraných modelovaných dějů s velkým vlivem na výsledek, tedy zanedbáním méně podstatných chemických dějů, jednak v nahrazení výpočtu chemických dějů výpočtem „předpovědi“ určené heuristickými aproximačními funkcemi určenými na základě přesného modelu všech dějů v rozsahu předpokládaných počátečních podmínek.

Příkladem zjednodušeného heuristického přístupu k modelování kinetických reakcí může být nahrazení složitěho systému organických látek v benzínu a jejich rozdílných kinetik hoření ve válci spalovacího motoru výpočtem hoření jedné látky (benzínu) s heuristickou kinetikou hoření. Tento přístup a jeho kalibrace byl publikován např. v dizertační práci [1].

Pro přiblížení zjednodušeného přístupu k modelování převážně rovnovážných chemických dějů jsme zvolili úlohu mísení kyselých technologických roztoků přítomných v hornině v lokalitě Stráž pod Ralskem se slivy z nadzemní technologie přepracovávající tyto roztoky vylučováním kamence. Cílem výzkumů je specifikovat podmínky, za kterých dojde k vysrážení nejnebezpečnějších kontaminantů, zejména těžkých kovů, z roztoku do horninového prostředí. Jedním z hlavních parametrů podmiňujících srážení těžkých kovů je pH roztoku. Navrhli jsme proto dva výpočetně nenáročné způsoby odhadu pH směsi dvou roztoků při jejich mísení a provedli jsme jejich srovnání s výsledky laboratorních měření. Tato část příspěvku vychází zejména z výsledků publikovaných v ročníkovém projektu V. Žabky [2] s experimentálními podklady ing. L. Gomboše [3].

Pro provedení testů a srovnání výsledků heuristických postupů je třeba mít k dispozici experimentální data, nebo data s experimentálními srovnatelná. Proto v současné době pracujeme na sestavení důvěryhodného modelu chemických rovnováh v programu Geochemist's Workbench a jeho ověření dalšími chemickými experimenty.

Příspěvek naznačuje možný postup zjednodušování komplexních chemických dějů pro zcela konkrétní případy a obsahuje dva příklady. Hlavní podmínkou pro úspěšnost takového postupu je však dostatek experimentálních dat pro kalibraci a ověření zjednodušeného modelu, což není podmínka vždy snadno splnitelná. Zásadní chyby potom při používání heuristických modelů vznikají tehdy, používají-li se v podmínkách, pro které nebyly ověřeny.

Reference

- [1] Šembera, J.: Aplikace MKP a MKO při studiu transportních jevů v proudícím plynu v proměnné oblasti, dizertační práce, FJFI ČVUT Praha, 2004.
- [2] Žabka, V.: Úprava a testování modelu transportu látek a chemických reakcí v podzemních vodách, ročníkový projekt KMO FM TUL, Liberec, 2006.
- [3] Gomboš, L.: Imobilizace – laboratorní ověřovací práce. Etapa I. Statické dávkové testy, Technická zpráva DIAMO s. p., o. z. TÚU, Stráž p. R., září 2005.